

Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada

FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada

FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA

Dissertação apresentada no Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas como parte dos créditos para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador:
Prof. Marcelo Leite Lyra

Maceió - Brasil
Janeiro - 1999

Para *Severino e Maria*

AGRADECIMENTOS

A muitas pessoas devo eterna gratidão. Teria que escrever diversas páginas, só com agradecimentos, para não esquecer de ninguém. Neste espaço irei agradecer às pessoas que merecem um destaque especial:

Aos profs. Hilário e Sinvaldo, que representaram meu primeiro passo na carreira científica, sempre me incentivaram e tiveram grande confiança em mim.

Ao prof. Roberto Jorge, uma pessoa fabulosa, que foi de importância fundamental em minha formação acadêmica e me fascinou com suas descrições sobre a *neve*. Roberto Jorge, você merecia bem mais do que os arpejos de um amador.

À prof. Maria Cristina, paciente com minhas dificuldades iniciais e sempre presente durante toda minha formação.

Aos profs. Marcos Couto e Gildemar Carneiro, pela amizade e confiança em mim depositadas.

Ao professor Heber, por sua paciência quase infinita, sua ajuda preciosa na parte computacional e suas lições de vida.

Aos outros professores do DF-UFAL, Artur, Cressoni, Crisogono, Evandro, Jan-dir, Jenner, Kleber, Ornelas, Solange e Teresa. A todos devo eterna gratidão pois durante quase seis anos representaram minha segunda família e foram de fundamental importância para minha formação acadêmica.

Ao meu orientador, Prof. Marcelo Lyra, o estrado de minha vida científica. Um exemplo vivo de trabalho, perseverança e seriedade. O Professor Marcelo Lyra respira física e faz seu trabalho com amor. É um exemplo para as gerações futuras. Eu agradeço não só pela orientação no mestrado como pela orientação durante a iniciação científica.

A todos os funcionários do DF-UFAL, em especial Fernandes e Ester, pela paciência e auxílio fundamentais ao meu trabalho.

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

Ao CNPq, CAPES e FAPEAL pelo apoio financeiro.

A meus padrinhos Manoel Vitor Tabosa e Margarida de Barros Tabosa que ajudaram muito minha família e a mim em horas de agonia.

Ao meu amor Elisangela, que me estimulou e depositou em mim dádivas importantíssimas para realização deste trabalho. Agradeço por sua paciência nas horas ininterruptas de trabalho e pelas palavras de conforto.

Ao Meu Pai, pessoa forte que fez despertar em mim a paixão pela ciência com suas perguntas sobre a natureza. Algumas destas perguntas foram respondidas, outras ainda estão por ser. Porém tenho certeza que sempre terei este entusiasta chamado Severino Fidelis de Moura para escutar as respostas. Pai, muito obrigado pela educação e o exemplo de seriedade e perseverança.

A minha mãe Maria José, que além de me educar representa um motivo de orgulho para mim. Após escapar das garras de uma moléstia, mostrou que a vida pode ser mais valiosa se for aproveitada com amor e perseverança. Sempre me estimulou e mostrou como superar as dificuldades. Mãe, você representa uma grande força e sua força foi de vital importância na minha vida e no meu trabalho.

A minha irmã que sempre esteve do meu lado apesar de nossas diferenças.
Quero agradecer a Deus, a quem dedico minha vida.

Resumo

É bem estabelecido que todos os estados de um único elétron em cadeias uni-dimensionais desordenadas são exponencialmente localizados. Argumentos de teoria de escala mostram que uma transição localização-delocalização, usualmente chamada de transição de Anderson, pode ser observada em sistemas com dimensionalidade $d > 2$. Recentemente, uma série de versões uni-dimensionais do modelo de Anderson têm mostrado que estados delocalizados podem ser induzidos por correlações internas sobre a distribuição de desordem. Neste trabalho, nós estudamos a natureza dos estados eletrônicos em dois modelos uni-dimensionais com correlações de longo alcance na distribuição de desordem. No primeiro modelo, consideramos as energias dos sítios como o traço de um movimento Browniano fracionário com densidade espectral $S(k) \propto 1/k^\alpha$ e os termos de hopping constantes. No segundo modelo analisado, consideramos o potencial constante e os termos de hopping correlacionados com uma densidade espectral $S(k) \propto 1/k^\alpha$. Nós estudamos a natureza dos estados de um único elétron usando um método de renormalização e computando o coeficiente de Lyapunov $\gamma(E)$ (inverso do comprimento de localização). Nós mostramos que os dois modelos exibem uma faixa de energias onde $\gamma(E)$ tende a zero, ou seja, uma transição metal-isolante. O modelo com correlações nas energias dos sítios exibe transição metal-isolante para $\alpha > 2$. Por outro lado, o modelo com correlações nas integrais de transferências exibe transição para $\alpha > 1$. Portanto, o parâmetro de correlação α desempenha uma papel semelhante a dimensionalidade do sistema na teoria de escala.

Abstract

It is well established that all eigenstates of one electron in one-dimensional disordered chains are exponentially localized. Scaling theory arguments assert that a localized-delocalized transition, usually referred to as an Anderson transition, can take place for systems with dimensionality $d > 2$. Recently, a series of one-dimensional versions of the Anderson model has been shown to exhibit a breakdown of Anderson's localization induced by internal correlations on the disorder distribution. In this work, we investigate the nature of one-electron states in two tight-binding one-dimensional models with long-range correlated disorder. In the first model, we consider the potential as the trace of a fractional Brownian motion with spectral density $S(k) \propto 1/k^\alpha$ and non-random hopping amplitudes. In the second model, we consider a non-random on-site energy and hopping amplitudes with long-range correlations exhibiting also a spectral density $S(k) \propto 1/k^\alpha$. We study the nature of electronic states using a renormalization group method and compute the Lyapunov coefficient $\gamma(E)$ (inverse localization length). We show that the Lyapunov coefficient vanishes within a finite range of energy values revealing the presence of an Anderson transition in these two models. The model with long-range correlations in the on-site energy distribution exhibits an Anderson transition for $\alpha > 2$. On the other hand, the model with long-range correlations in the hopping amplitudes exhibits an Anderson transition for $\alpha > 1$. Therefore, the correlation exponent α takes a role similar to the one assumed by the system's dimensionality in the scaling theory of the Anderson metal-insulator transition.

Sumário

| | |
|--|-----------|
| Folha de rosto | i |
| Dedicatória | ii |
| Agradecimentos | iii |
| Resumo | v |
| Abstract | vi |
| Índice | vii |
| 1 A natureza dos estados eletrônicos em sólidos | 1 |
| 1.1 Introdução | 1 |
| 1.2 Propriedades de transporte eletrônico em sistemas sem desordem. | 3 |
| 1.2.1 Um breve histórico sobre modelos de condução. | 3 |
| 1.2.2 O modelo de Bloch | 4 |
| 1.2.3 A superfície de Fermi | 6 |
| 1.3 Transição metal-isolante induzida por correlação entre os elétrons - transição de Mott | 8 |
| 1.4 Propriedades de transporte eletrônico em materiais amorfos | 9 |
| 1.5 O modelo de Anderson | 15 |
| 1.5.1 A dependência da transição de Anderson com a dimensão. | 18 |
| 1.6 O modelo de Anderson com correlações | 21 |
| 2 O modelo de Anderson com correlações de longo alcance | 26 |
| 2.1 A correlação de longo alcance | 26 |
| 2.1.1 O movimento Browniano fracionário | 27 |
| 2.1.2 Simulando um movimento Browniano fracionário | 28 |
| 2.2 O modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas energias dos sítios. | 29 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.2.1 | O método de renormalização usando operador de Green. | 31 |
| 2.2.2 | A natureza dos estados Eletrônicos. | 35 |
| 2.2.3 | A densidade de estados para o modelo de Anderson. | 37 |
| 2.3 | O modelo de Anderson com correlações de longo alcance no hopping | 38 |
| 3 | Resultados e Discussões | 40 |
| 3.1 | O modelo de Anderson com correlações de longo alcance entre as energias dos sítios | 40 |
| 3.2 | Modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping | 52 |
| 4 | Conclusões e perspectivas | 59 |
| | Referências | 61 |
| A | - Apêndices | 65 |
| A.1 | Programa em Fortran | 65 |

Capítulo 1

A natureza dos estados eletrônicos em sólidos

1.1 Introdução

As propriedades físicas de sólidos periódicos e homogêneos são atualmente conhecidas graças às formulações da mecânica estatística e da mecânica quântica, respectivamente desenvolvidas no final do século XIX e nas primeiras décadas deste século. Entretanto, uma grande parte dos sólidos encontrados na natureza, e mesmo os produzidos em laboratório, não são constituídos por uma estrutura cristalina perfeita e homogênea. A partir dos anos sessenta, com a possibilidade de controlar as propriedades físicas dos materiais através das várias técnicas de dopagem, é que o estudo teórico de sistemas desordenados tem recebido considerável interesse. Os sistemas desordenados podem ser classificados, segundo o tipo de desordem, como: sistemas com desordem estrutural, nos quais os átomos são distribuídos aleatoriamente sem qualquer arranjo espacial particular e sistemas com desordem composicional, nos quais diferentes tipos de íons ocupam, aleatoriamente, pontos de uma rede periódica perfeita. De acordo com a existência ou não de correlação na distribuição de desordem, os sistemas desordenados podem também ser

classificados como temperados e recozidos. O arranjo atômico nos sistemas temperados é obtido através de processos de resfriamento brusco a partir de altas temperaturas. Logo, a distribuição das impurezas sobre os sítios não mantém nenhuma correlação. Nos sistemas recozidos, a distribuição de impurezas, obtida através de processos de resfriamento lento, é tal que minimiza a energia livre do sistema. Portanto, a existência de correlações entre os constituintes não permite uma distribuição completamente aleatória.

A presença de desordem altera qualitativamente as propriedades físicas dos sólidos. Em sistemas magnéticos diluídos onde um dos constituintes é não magnético, a temperatura crítica apresenta um comportamento fortemente dependente da desordem[1, 2]. No final década de cinquenta, Anderson mostrou que a natureza dos estados eletrônicos em sólidos desordenados também apresenta uma forte dependência com o grau de desordem existente[3]. Para desordem fraca as funções de onda eletrônicas são estendidas e o comportamento do sistema é tipicamente metálico[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.

O modelo de Anderson prevê que todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados em cadeias uni-dimensionais. Entretanto, nos últimos dez anos, uma série de extensões do modelo de Anderson uni-dimensional têm sido propostas nas quais estão presentes estados estendidos ressonantes[6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]. O novo ingrediente presente nestes modelos é a existência de correlações de curto alcance na distribuição da desordem. Na natureza, vários sistemas apresentam sequências desordenadas com correlações de longo alcance como, por exemplo, a sequência de nucleotídios da molécula de DNA[15, 16]. Neste trabalho analisaremos os efeitos de correlações de longo alcance na natureza dos estados eletrônicos do modelo Anderson unidimensional.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: No restante deste capítulo vamos apresentar uma revisão teórica sobre propriedades de transporte eletrônicos em sistemas puros (sem desordem) e com desordem. No capítulo 2, vamos apresentar o método que nós utilizaremos neste trabalho para estudar as propriedades de transporte eletrônico do modelo de Anderson uni-dimensional com correlações de longo alcance. No capítulo 3, vamos apresentar os resultados obtidos. Finalmente, no capítulo 4, apresentaremos nossas considerações finais e perspectivas.

1.2 Propriedades de transporte eletrônico em sistemas sem desordem.

Nesta seção vamos estudar as propriedades de transporte eletrônico em redes cristalinas. Uma discussão mais detalhada pode ser encontrada nas referências[17, 18, 19]. As propriedades de transporte eletrônico estão diretamente ligadas à natureza dos estados eletrônicos e à distribuição das bandas de energia e podem caracterizar a rede como condutora ou isolante. Vamos inicialmente fazer um breve histórico de modelos de condução e em seguida estudar o modelo de Bloch que descreve os estados de um elétron na presença de um potencial cristalino.

1.2.1 Um breve histórico sobre modelos de condução.

As propriedades que alguns sólidos têm de conduzir calor e eletricidade os classifica como metais. Durante os últimos cem anos os físicos vêm desenvolvendo modelos simples para estudar as propriedades metálicas de sólidos. A descoberta do elétron, por J.J Thomson em 1897, causou um impacto nas teorias da estrutura da matéria. Três anos depois que J.J Thomson descobriu o elétron, P. Drude propôs seu modelo teórico para condução. Drude aplicou uma teoria cinética de gases a um metal tratando os elétrons de condução como um gás diluído. Em seu modelo, Drude desprezou as colisões entre elétrons, podendo estes apenas colidir com os íons da rede. A distribuição de velocidades para os elétrons no modelo de Drude é, como no caso de um gás clássico de densidade $n = N/V$, dada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann.

O modelo de Drude prevê corretamente a linearidade entre a densidade de corrente J e o campo elétrico E . Entretanto, obtém a condutividade σ em função do tempo médio entre as colisões τ ($\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$, onde e é a carga do elétron e m a massa do elétron). O tempo médio entre colisões pode ser estimado como sendo $\tau = l/v_m$ onde l é o livre caminho médio entre colisões e v_m é a velocidade média dos elétrons. O livre caminho médio, de acordo com a teoria de Drude, é da ordem do espaçamento médio entre os íons e portanto independente da temperatura. A velocidade média dos elétrons pode ser obtida através do teorema da equipartição de energia como sendo $v_m \propto T^{-1/2}$. Logo, o modelo de Drude previa que $\sigma \propto T^{-1/2}$. Experimentalmente, a temperatura ambiente, a condutividade de

sólidos puros é inversamente proporcional a temperatura ($\sigma \propto T^{-1}$). Para que o modelo de Drude pudesse reproduzir os resultados experimentais era necessário considerar que o livre caminho medio crescia com o decréscimo da temperatura como $l \propto T^{-1/2}$, o que era incompatível com a hipótese de colisão com os íons da rede. Ainda mais, para deduzir a dependência de σ com a temperatura T foi utilizada uma das previsões da teoria de Drude para a capacidade térmica do elétron ($C_v = 3K_B/2$), a qual também não era observada experimentalmente.

Estes paradoxos, que pairaram sobre o modelo de Drude até as três primeiras décadas deste século, só foram removidos com o advento da teoria quântica. O princípio de exclusão de Pauli requer que a distribuição de Maxwell-Boltzmann seja trocada pela de Fermi-Dirac. Sommerfeld aplicou esta distribuição a um gás de elétrons livres e resolveu a anomalia térmica do modelo de Drude. Entretanto, modelos de elétrons livres são modelos irrealis pois na natureza existem diversos tipos de interação às quais os elétrons estão sujeitos. É importante portanto considerar problemas onde os elétrons estejam sujeitos a algum tipo de interação (potenciais). A teoria de Bloch é uma extensão da teoria de Sommerfeld para o caso de um elétron na presença de um potencial periódico constante no tempo.

1.2.2 O modelo de Bloch

O modelo de Bloch contém os ingredientes básicos ao estudo dos estados estacionários de um elétron em um potencial cristalino $U(r)$ com periodicidade $U(r + R) = U(r)$, onde R é um vetor de Bravais típico da rede. O comprimento de periodicidade do potencial U é da ordem de 10^{-8} cm, o qual é comparável ao tamanho típico do comprimento de onda de De Broglie para um elétron. Desta forma, é essencial o uso de mecânica quântica para analisar os efeitos da periodicidade sobre o movimento do elétron.

O problema de elétrons em sólidos é, em princípio, um problema de muitos elétrons. O Hamiltoniano de um sólido contém, além dos termos de barreira de potencial que descrevem as interações do elétron com o núcleo dos íons, termos de interação elétron-elétron. Fazendo a aproximação de elétrons independentes, estas interações passam a ser representadas por um potencial periódico $U(r)$. Na Fig. 1.1 podemos observar o padrão típico de um potencial cristalino.

Como as propriedades de transporte eletrônico em sistemas periódicos são diretamente relacionadas à natureza dos estados eletrônicos, vamos analisar as propriedades

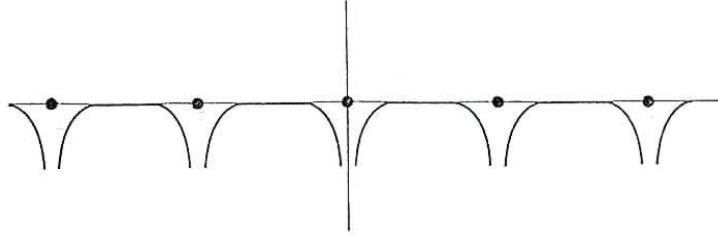


Figura 1.1: Padrão típico de um potencial cristalino.

gerais dos estados de um único elétron na presença de um potencial periódico $U(r)$. Os estados estacionários de um elétron podem ser obtidos a partir da equação de Schroedinger

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

onde o potencial $U(r)$ tem a periodicidade da Fig. 1.1. A equação de Schroedinger para o elétron livre é um caso particular da Eq. 1.1. O potencial zero é um exemplo simples de periodicidade. Elétrons independentes que obedecem a Eq. 1.1 são conhecidos como elétrons de Bloch (os elétrons de Bloch se tornam elétrons livres quando o potencial periódico $U(r)$ é identicamente nulo). Os estados estacionários $\psi(r)$ do Hamiltoniano de um único elétron $H = p^2/2m + U(r)$ podem ser escolhidos tendo a forma de uma onda plana vezes uma função que retém a periodicidade da Rede de Bravais:

$$\psi_{n,k}(r) = e^{ik \cdot r} u_{n,k}(r), \quad (1.2)$$

onde

$$u(r + R) = u(r), \quad (1.3)$$

e R é um vetor de Bravais. Os estados $\psi_{n,k}(r)$ são os conhecidos estados de Bloch. Equivalentemente, os autoestados de H podem ser escolhidos da forma

$$\psi(r + R) = e^{ik \cdot R} \psi(r). \quad (1.4)$$

Os autoestados de Bloch envolvem um vetor de onda k que tem propriedades semelhantes ao vetor de onda k do modelo do elétron livre. Note, entretanto, que no

modelo do elétron livre o vetor de onda é simplesmente p/\hbar , onde p é o momento linear de um elétron. No caso de Bloch k não é proporcional ao momento do elétron pois não existe invariância translacional no Hamiltoniano. Na teoria de Bloch podemos visualizar o vetor de onda k como um número quântico que caracteriza as invariâncias translacionais de um potencial periódico. O índice n aparece no teorema de Bloch pois para um dado k existem muitas soluções para a equação de Schroedinger. Para cada índice quântico n , o conjunto de níveis eletrônicos especificados por $E_n(k)$ é chamado de banda de energia. Cada banda acomoda $2N$ elétrons, onde N é o número de células primitivas no cristal e o fator 2 vem da degenerescência de spin.

1.2.3 A superfície de Fermi

O estado fundamental de N_l elétrons livres é obtido ocupando todos os níveis com energia $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ menores que E_f . A energia de Fermi E_f é definida como a energia do nível preenchido mais elevado do estado fundamental. O estado fundamental de N_l elétrons de Bloch é similarmente construído, exceto que os níveis de energia são controlados por dois números quânticos (n e k) e que $E(k)$ não tem uma forma explícita simples como no caso do elétron livre. O vetor k deve ser confinado em uma célula primitiva da rede recíproca já que cada estado deve ser contado uma única vez. Quando os níveis mais baixos são preenchidos dois diferentes tipos de configuração aparecem:

a) Um certo número de bandas completamente preenchido e todas as outras vazias. A diferença entre o topo da banda ocupada mais alta e o nível mais baixo da primeira banda vazia subsequente é conhecido como "gap". Como não existe sobreposição entre as bandas (Fig. 1.2a), o "gap" entre a última banda ocupada e a primeira banda vazia é grande. Para que o sistema venha a conduzir é necessário aplicar um campo elétrico bastante intenso de modo que os elétrons tenham energia suficiente para transpor o "gap" e chegar a banda vazia subsequente. Em geral sistemas sem sobreposição entre as bandas, como mostrado na Fig. 1.2a, são isolantes.

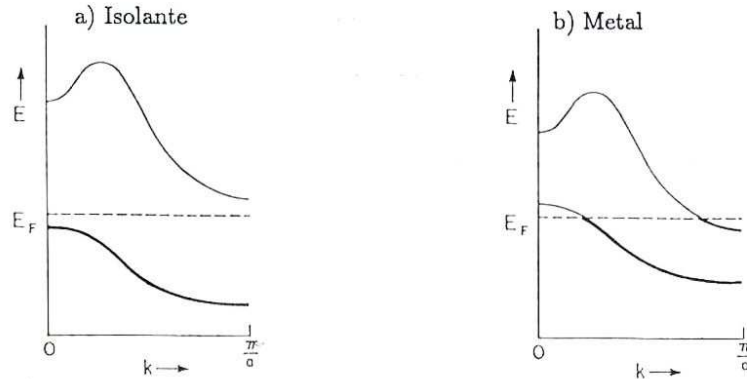


Figura 1.2: a) Estrutura de Bandas de um material Isolante. Não existe sobreposição entre as bandas. b) Estrutura de Bandas de um material condutor. Observe a sobreposição entre as bandas de valência e condução.

b) A banda de valência parcialmente preenchida. Podemos observar na Fig. 1.2b que esta configuração surge sempre que ocorre uma sobreposição entre as bandas. Qualquer pequeno campo elétrico aplicado tem energia suficiente para excitar os elétrons. Neste caso o sistema torna-se condutor.

Uma pequena mudança na pressão ou temperatura pode fazer com que a estrutura de bandas de um cristal cruze de uma configuração para outra induzindo assim uma transição metal-isolante. Nos cristais as funções de onda eletrônicas, seja na fase metálica ou isolante, são as funções de Bloch. A Fig. 1.3 mostra uma função de onda para um elétron de Bloch. Como consequência da periodicidade cristalina, a função de onda é estendida por todo sistema. Logo, a probabilidade de qualquer posição ser ocupada pelo elétron é sempre diferente de zero. O elétron pode mover-se livremente por todo o sistema, não sendo portanto espalhado por um potencial perfeitamente periódico. Este fenômeno puramente quântico é a principal origem da falha da teoria de Drude em prever a dependência correta da condutividade com a temperatura. Em geral, os elétrons são espalhados apenas por imperfeições na rede cristalina as quais podem ter origem nas próprias vibrações da rede ou na presença de impurezas no cristal.

As teorias baseadas em potenciais periódicos e elétrons não interagentes são idealizações. Sólidos reais nunca são absolutamente puros e apresentam interações entre os elétrons. Teorias de bandas que tratam sólidos não puros ou elétrons interagentes são

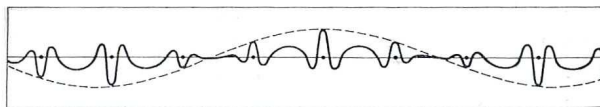


Figura 1.3: Padrão típico de uma função de onda para um elétron de Bloch.

bastante aceitas para se explicar as propriedades de dispositivos eletrônicos como junções PN e NP. Na seção seguinte, vamos estudar os efeitos de interações elétron-elétron sobre a natureza dos estados estacionários.

1.3 Transição metal-isolante induzida por correlação entre os elétrons - transição de Mott

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[20, 21]. Vamos considerar um sistema com N átomos, com um único elétron de condução por átomo. A energia média de um elétron localizado sobre um único orbital é a energia de ligação entre o orbital e o elétron que, para simplificar, será escolhida igual a zero. No caso cristalino estes N elétrons vão dar origem a uma banda de largura B (ver Fig. 1.4a). Já que a banda vai de $-B/2$ a $B/2$ a energia média de um elétron de valência é aproximadamente $-B/4$. Esta redução da energia é responsável pela coesão metálica. Porém, devemos considerar que, como o sistema é metálico, os elétrons têm grande mobilidade e podem ocupar quaisquer um dos orbitais do sistema, criando a possibilidade de duplas ocupações.

O valor $U = \langle e^2/r_{12} \rangle$ é o custo de energia para que dois elétrons ocupem um mesmo orbital atômico. Já que as probabilidades de ocorrer orbital vazio, com um e dois elétrons são $1/4, 1/2$ e $1/4$ respectivamente, o custo de energia média para duplas ocupações é $U/4$. Logo a energia média de um elétron delocalizado é $-B/4 + U/4$. A transição metal-isolante induzida por interação elétron-elétron consiste de uma competição entre o abaixamento médio da energia ($B/4$) ocasionado pela delocalização e o custo de correlação

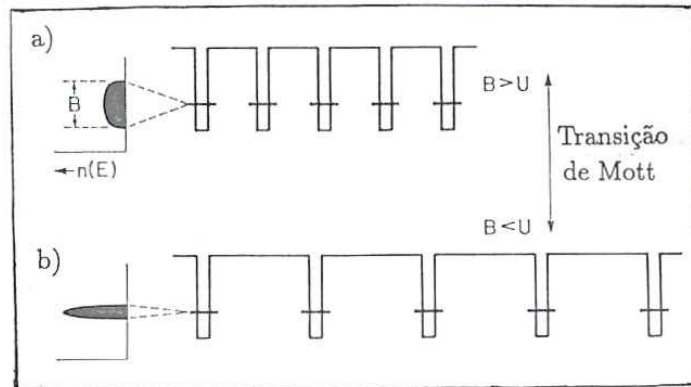


Figura 1.4: Esquema da Transição de Mott. a) Quando a largura da banda cristalina B é suficientemente maior que a interação elétron-elétron U a delocalização é energeticamente favorável ao sistema. b) Quando a largura da banda cristalina B é suficientemente menor que a interação elétron-elétron U acontece a localização induzida por correlação

($U/4$) devido às duplas ocupações. Se $-B/4 + U/4$ for maior que a energia média de um elétron localizado a delocalização é uma configuração energeticamente desfavorável. Desta análise fenomenológica, podemos deduzir que a condição de localização induzida por interação entre os elétrons é dada, aproximadamente por:

$$U > B \quad (1.5)$$

1.4 Propriedades de transporte eletrônico em materiais amorfos

Em materiais amorfos, k não é um bom número quântico, uma vez que a validade das funções de Bloch depende da presença da periodicidade cristalina que no caso de materiais amorfos não existe. A transição Metal-Isolante apresentada na seção 1.1.2 não aparece em materiais amorfos. O tipo de transição metal-isolante mais relevante nestes materiais é a transição metal-isolante induzida por desordem, comumente referida como transição de Anderson.

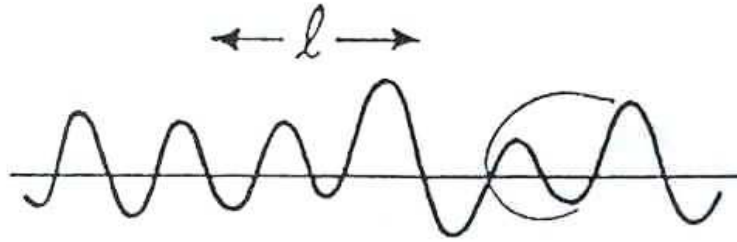


Figura 1.5: Função de onda estendida. O livre caminho médio l é o comprimento de coerência quando o grau de desordem é fraco.

Vamos inicialmente discutir qualitativamente o papel da desordem na natureza dos estados eletrônicos. Os estados de um elétron livre são funções de onda espalhadas por todo espaço. Se introduzirmos uma única barreira de potencial, a função de onda será parcialmente transmitida e parcialmente refletida pela barreira. Se, ao invés de uma única barreira, intruzirmos 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 em fase. Se o grau de desordem for fraco a função de onda continua estendida, porém perde sua coerência em fase após múltiplas reflexões. O comprimento de coerência é o livre caminho médio como exemplificado na Fig. 1.5.

Se o grau de desordem for forte, as interferências destrutivas induzem uma localização exponencial da função de onda. A função de onda torna-se concentrada em uma pequena região e tem valor desprezível em qualquer outra região do sólido. A probabilidade de se encontrar o elétron a uma distância R do centro da função de onda decai exponencialmente $\psi(R) \propto e^{-\lambda R}$. A quantidade λ , um parâmetro importante que pode caracterizar um estado eletrônico quanto a localização, é chamado de inverso do comprimento de localização como mostrado na Fig. 1.6.

Para desordens intermediárias o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante a depender da localização da energia de Fermi. O mecanismo que comanda a transição de Anderson pode ser ilustrado da seguinte forma: Na Fig. 1.7a os poços de potencial representam sítios atômicos que têm a mesma separação espacial. Os valores

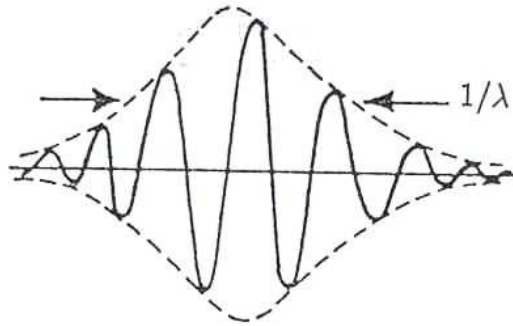


Figura 1.6: Função de onda localizada. $1/\lambda$ mede a largura típica da função de onda e é também chamado de comprimento de localização.

dos potenciais (a profundidade dos poços) são aleatoriamente escolhidos numa faixa de largura W . O caso sem desordem é mostrado na Fig. 1.7b onde B é a largura da banda de energias permitidas para o elétron.

Em 1958, P.W. Anderson mostrou que se W/B for suficientemente grande, todos os estados na banda de valência são localizados. O critério qualitativo para existir localização induzida por desordem é dado por

$$W > B. \quad (1.6)$$

O modelo de Anderson, como será mostrado mais tarde, considera os termos básicos para descrever elétrons independentes movendo-se em um potencial aleatório. O aspecto de elétrons independentes retira do Hamiltoniano os termos de interação elétron-elétron, responsáveis pela transição de Mott. A noção de localização induzida por desordem foi substancialmente estendida por Mott e outros[22, 23] e influenciou fortemente as teorias sobre estados eletrônicos em semicondutores amorfos. Quando a desordem no potencial é suficientemente grande a ponto da razão W/B satisfazer a condição de Anderson, todos os estados na banda são exponencialmente localizados. Entretanto, se $W/B \approx 1$ (desordem intermediária) estados estendidos e localizados podem coexistir. A densidade de estados em vidros é mostrado na figura Fig. 1.8b. A faixa de energias para as quais os estados são localizados (regiões sombreadas) começa no topo da banda de valência e vai até a parte inferior da banda de condução. A energia que separa as regiões de estados estendidos e localizados é chamada de *mobility edge*. A transição de Anderson representa uma transição

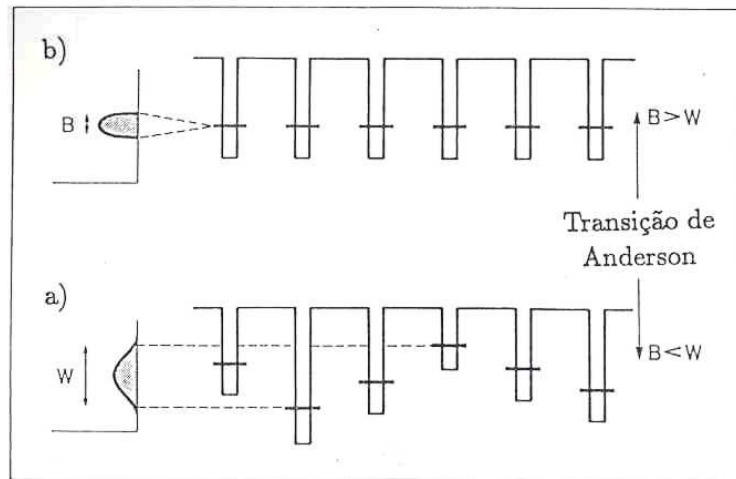


Figura 1.7: Esquema da transição de Anderson. a) Potencial aleatório com largura W . b) Potencial cristalino onde B é a largura da banda de energias permitidas ao elétron. Quando a largura da desordem W é maior que a largura da banda cristalina B , ocorre localização.

localização-delocalização em que uma mudança (em composição, pressão, campo elétrico aplicado etc.) empurra o nível de Fermi através do *mobility edge*. A densidade de estados para um cristal é mostrada na Fig. 1.8a. Entre a banda de valência e a banda de condução não existem estados energéticos acessíveis aos elétrons. Esta faixa onde $n(E) = 0$, é chamada de "gap". Em princípio, esta faixa de energia pode ser preenchida no caso de um amorfo. O "gap" de energia do cristal é trocado por um "pseudogap" em sólidos amorfos. No "pseudogap" $n(E)$ é pequeno e em geral é composto por estados eletrônicos exponencialmente localizados.

Existem várias maneiras de compreender por que os estados de um único elétron na presença de um potencial desordenado são susceptíveis a localização. Um elétron pode mover-se com facilidade de um sítio para outro se a diferença de energia entre eles for no máximo da ordem de B/z onde B é a largura da banda cristalina e z é o número de coordenação da rede. Sítios que estão energeticamente separados por quantidades maiores que B/z estão efetivamente desacoplados. Outra maneira bastante simples para se entender, topologicamente, o papel da desordem é fazer um análogo clássico ao modelo de Anderson. Consideraremos o exemplo de uma partícula clássica em um potencial aleatório[24]. A Fig. 1.9 mostra um potencial bi-dimensional em forma de mapa topográfico.

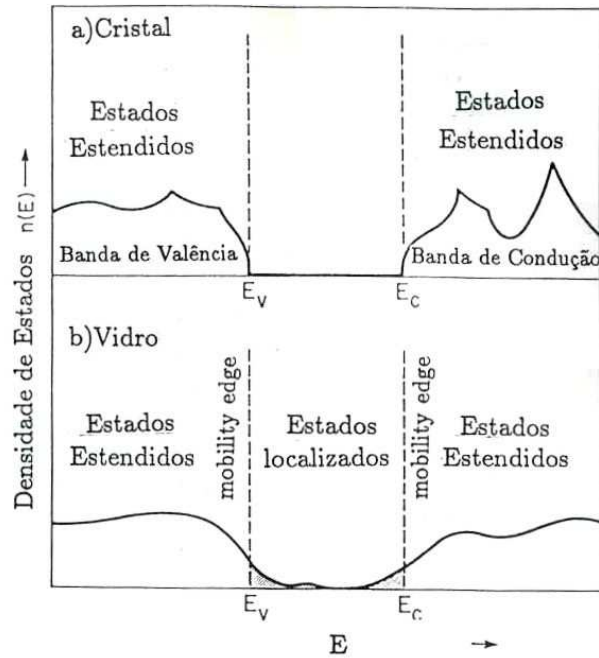


Figura 1.8: Densidade de estados em materiais cristalinos(a) e amorfos(b).

As linhas de contorno são linhas equipotenciais. Para uma partícula clássica de energia E , regiões com $V(r) > E$ são inacessíveis, enquanto que regiões onde $V(r) < E$ permitem sua passagem. Uma analogia imediata pode ser feita, considerando que a Fig. 1.9 é a foto aérea de uma parte da terra. As regiões escuras (cercadas pelas linhas de mesmo potencial) representam a superfície sólida da terra com altitude $V(x, y)$. As regiões claras representam água que têm nível E . A Fig. 9c apresenta diversas regiões claras cercadas por regiões escuras (água cercada por terra, mais comumente chamado de lago). Nestas regiões $E < V(r)$. A Fig. 1.9a tem regiões claras extensas, sem nenhuma terra que a contorne totalmente (oceano), nestas regiões $E > V(r)$. Um navio teria bastante mobilidade na fase oceânica mostrada na Fig. 1.9a, porém ficaria localizado a pequenos lagos na fase mostrada na Fig. 1.9c. A transição localização-delocalização ocorre como a transição lago-oceano para um navio.

Voltando para o exemplo de uma partícula clássica de energia E na presença de um potencial $V(r)$, é evidente que apenas estados localizados aparecem para $E < E_c$ e estados estendidos surgem para $E > E_c$. A energia crítica E_c é equivalente ao nível crítico de

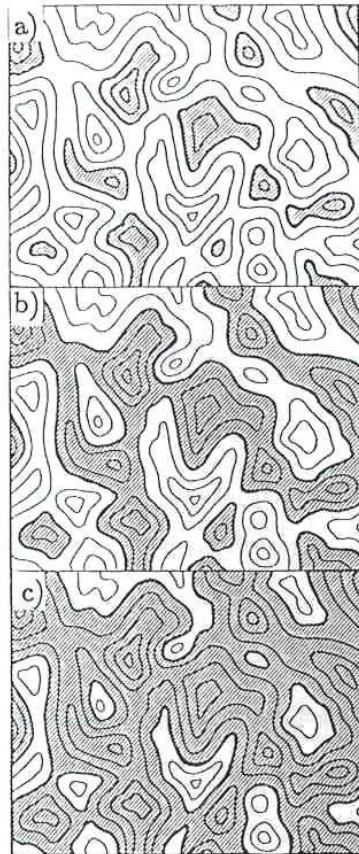


Figura 1.9: Potencial aleatório bi-dimensional. a) Desordem fraca. b) Desordem intermediária. c) Desordem forte.

água em que ocorre a transição lago-oceano da nossa analogia. O problema da mobilidade de uma partícula clássica na presença de um potencial aleatório contínuo é uma espécie de problema de percolação contínua. Percolação contínua é uma generalização da percolação de sítios. A variável que representa a probabilidade de ocupação de um sítio p é trocada pela quantidade $\phi(E)$. $\phi(E)$ representa a fração do espaço no qual uma partícula de energia E pode se movimentar. Quando $\phi(E)$ excede um valor crítico ϕ_c , passa a existir um caminho infinito e a partícula pode se movimentar por regiões da ordem do tamanho do sistema (fase "oceano" para o navio). A energia crítica, ou energia de transição, satisfaz a equação: $\phi(E_c) = \phi_c$. Em duas dimensões $\phi_c = 1/2$ ou seja, um só caminho percolativo

pode aparecer. Uma explicação para isto é que duas redes infinitas não podem evitar a intersecção em 2d. Em uma dimensão é evidente que $\phi_c = 1$, pois a única forma de percolação é que toda a cadeia permita a passagem da partícula. Em 3d $\phi_c = 0.16$.

Todas as discussões feitas sobre o potencial da Fig. 1.9 são eficientes quando se trata de física clássica. Para elétrons reais, regiões com $E < V(r)$ ainda são permitidas. Os fundamentos de mecânica quântica mostram que elétrons podem tunelar barreiras de potencial e apresentam características ondulatórias. Estes dois aspectos modificam substancialmente as previsões da teoria clássica em comparação ao comportamento previsto pela teoria quântica. No modelo de percolação contínua "clusters" finitos coexistem com caminhos de percolação. Isto sugere que funções de onda localizadas podem persistir na presença de estados estendidos em uma mesma energia. Porém, estados localizados e estendidos são claramente separados por *mobility edges* no espectro de energia. Um segundo aspecto distinto é quanto a dependência com a dimensão. Tanto teoria de percolação clássica quanto quântica têm estados localizados por desordem em 1d. Entretanto, uma transição de percolação clássica existe em 2d, enquanto que percolação quântica só ocorre para $d > 2$. A dependência explícita da transição de Anderson com a dimensão do sistema pode ser obtida através da teoria de escala formulada na seção 1.5.

1.5 O modelo de Anderson

O modelo de Anderson foi de importância fundamental para compreender as transições metal-isolante que ocorrem em diversos materiais, mais notavelmente no Si:P[25]. Anderson considerou apenas os elementos essenciais para se estudar a natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. O Hamiltoniano do modelo de Anderson contém um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos os quais contém um potencial aleatório. O Hamiltoniano de Anderson expresso numa representação de segunda quantização é dado por

$$H = \sum_i E_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} T_{ij} c_i^\dagger c_j. \quad (1.7)$$

E_i é energia do sítio i , T_{ij} é o elemento de matriz do Hamiltoniano entre os sítios i e j , e c_i^\dagger e c_i são operadores de criação e destruição de elétrons no sítio i . O elemento de matriz T_{ij} é chamado de integral de transferência e conecta os sítios i e j (outro nome para T_{ij} é amplitude de *hopping*). Esta energia é uma medida do acoplamento entre os sítios e é uma

função que decresce muito rapidamente com a distância entre os sítios. A característica fundamental da Eq. 1.7 é que as energias E_i são escolhidas aleatoriamente dentro de um intervalo de largura W . A obtenção dos autoestados eletrônicos ψ envolve a solução da equação de Schroedinger com um termo aleatório. Uma maneira simples de analisar o modelo é usar a expansão $\psi = \sum_i a_i \phi_i$, onde ϕ_i representa o orbital atômico centrado no sítio i (ϕ_i é a função de onda de um elétron localizado no sítio i ; o conjunto de todos os ϕ_i , para $i = 1, 2, 3, \dots, N$ forma um conjunto completo que pode ser usado para expandir a função de onda ψ). Se ψ é autofunção de H com energia E temos $H\psi = E\psi$, logo

$$Ea_i = E_i a_i + \sum_j T_{ij} a_j. \quad (1.8)$$

Se ψ é um estado não estacionário os coeficientes a_i obedecem a equação de Schroedinger dependente do tempo

$$\frac{\hbar}{i} \frac{da_i}{dt} = E_i a_i + \sum_j T_{ij} a_j. \quad (1.9)$$

Suponha que em $t = 0$, um elétron é colocado no sítio m de tal forma que $a_m(t = 0) = 1$, $a_i(t = 0) = 0$ para $i \neq m$. Assumindo que é possível resolver a Eq. 1.9 vamos examinar $a_m(t)$ 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 $a_m(t \rightarrow \infty) = 0$, o elétron foi difundido através da rede (estado estendido). Se $a_m(t \rightarrow \infty) \neq 0$, então o elétron não foi difundido por toda a rede e pode ser encontrado no sítio m e nas vizinhanças de m (estado localizado). Para compreender melhor a natureza dos estados eletrônicos vamos analisar a equação 1.8 em alguns casos limites. Como o elemento fundamental do modelo de Anderson é a desordem no potencial podemos fazer algumas simplificações que não mudam a distribuição de desordem. Vamos supor que os potenciais estão distribuídos sobre uma rede regular e que só existem integrais de transferência entre primeiros vizinhos. Uma outra simplificação é supor que todos os z primeiros vizinhos mantém a mesma interação. Logo, a Eq. 1.8 fica

$$Ea_i = E_i a_i + T_{01} \sum_{j=1}^{j=z} a_{i+j}, \quad (1.10)$$

onde T_{01} é a integral de transferência entre qualquer par de sítios da rede. A soma da Eq. 1.10 se estende sobre os z primeiros vizinhos do sítio i . O problema sem desordem pode ser resolvido como caso limite da Eq. 1.10. No caso cristalino, $W = 0$ e as energias

E_i são todas iguais (podem ser escolhidas $E_i = 0$). Para uma cadeia linear ($d = 1$) a Eq. 1.10 fica

$$Ea_i = T_{01}(a_{i-1} + a_{i+1}). \quad (1.11)$$

Funções exponenciais complexas obedecem equações semelhantes a Eq. 1.11. Logo, podemos escolher $a_n = a_0 e^{ink}$ e mostrar que a Eq. 1.11 é satisfeita se $E = 2T_{01} \cos(k)$. Isto corresponde a banda cristalina da teoria de Bloch ($-2T_{01} < E < +2T_{01}$). Portanto, no caso de cadeias unidimensionais ($z = 2$) a largura da banda cristalina é $B = 4T_{01}$. De uma forma geral a largura da banda cristalina para uma rede de dimensão d com número de coordenação z é $B = 2zT_{01}$. Outro caso limite seria $W \neq 0$ e $T_{01} = 0$. Com o acoplamento removido teríamos os orbitais atômicos com solução do problema.

O problema sem simplificações foi atacado por Anderson através de teoria de perturbação. Ele usou W como sendo a perturbação em um caso e T_{ij} em outro. Anderson encontrou diferenças nas duas maneiras de analisar perturbativamente o problema. Uma solução mais rigorosa deste problema requer técnicas sofisticadas envolvendo funções de Green que vão ser apresentadas no capítulo 2. Através de teoria de perturbação vamos apresentar um argumento, não muito rigoroso, que justifica a condição para a ocorrência da localização de Anderson $W > B$: Considere T_{ij} como perturbação e os orbitais atômicos ϕ_i como estados não perturbados. A teoria de perturbação mistura os estados. Em primeira ordem Ψ é dado por

$$\Psi = \phi_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} \phi_j. \quad (1.12)$$

As amplitudes a_{ij} são proporcionais a $T_{01}/(E_i - E_j)$. As contribuições de mais alta ordem adicionam termos que são essencialmente potências de $T_{01}/(E_i - E_j)$. Desta forma, para se obter os estados perturbados temos que somar uma série cujos termos são potências de $T_{01}/(E_i - E_j)$. As energias E_i e E_j estão dentro da distribuição de desordem (que tem largura W). Vamos assumir que E_i esteja no centro da distribuição e que as energias E_j dos z sítios vizinhos estão uniformemente espaçadas por intervalos W/z . Em média o menor valor de $(E_i - E_j)$ é $W/2z$. Logo, o maior valor de $T_{01}/(E_i - E_j)$ é $2zT_{01}/W$. Para que a série seja convergente o termo $2zT_{01}/W$ deve obedecer ao critério $2zT_{01}/W < 1$. Se este critério for obedecido o estado inicial continua localizado. Observe que como $B = 2zT_{01}$ fica estabelecida a condição de localização de Anderson $W > B$.

| O modelo de Anderson | A reformulação de Thouless |
|--|---|
| Sítio atômico i | Um cubo d -dimensional de volume L^d contendo muitos sítios. |
| A largura W da distribuição de energias dos sítios $\{\varepsilon_i\}$. | O espaçamento médio $\Delta E \approx W/N$ entre os N níveis dentro de um cubo. |
| A integral de transferência ou termo de hopping T_{ij} entre os sítios. | O deslocamento δE na energia dos níveis causado por mudanças nas condições de contorno na interface do cubo. |
| $(W/B) \approx (W/2zT_{01})$, uma medida da força da desordem. | $(\Delta E/\delta E) \approx (1/g)$, onde g é uma condutância generalizada que será usada como um parâmetro de desordem. |

Tabela 1.1: A correspondência entre a formulação tradicional e a formulação de teoria de escala para o modelo de Anderson.

1.5.1 A dependência da transição de Anderson com a dimensão.

A simples teoria de escala que vamos utilizar para obter a dependência da transição de Anderson com a dimensão foi apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello, e Ramakrishnan[4]. Vamos aplicar a teoria de escala na reformulação do modelo de Anderson feita por Thouless[26]. A reformulação de Thouless é mostrada na tabela acima:

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 as outras. As energias características do modelo de Anderson W e B (ou T_{01}) são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os níveis ΔE e no deslocamento δE causado por mudanças nas condições de contorno.

Um elegante argumento eurístico, baseado no princípio da incerteza, conecta δE com a condutividade σ no limite macroscópico. Através do princípio da incerteza pode-se estabelecer que:

$$\delta E = \hbar/t_D, \quad (1.13)$$

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

$$t_D = L^2/D, \quad (1.14)$$

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

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.15)$$

e combinando as Eq. 1.13-15 temos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (1.16)$$

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

$$n(E) = 1/(L^d \Delta E). \quad (1.17)$$

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

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.18)$$

Substituindo as Eq. 1.16 e 1.17 na Eq. 1.18 podemos observar a dimensionalidade e a dependência de escala que o parâmetro g apresenta

$$g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2}. \quad (1.19)$$

A Eq. 1.19 se aplica apenas a estados estendidos no limite macroscópico, desde que a Eq. 1.16 é verdadeira neste limite. O termo $L^{d-2}\sigma$ é a condutância de um cubo (d-dimensional) de lado L e condutividade σ . Logo, a função $g(L)$ pode ser vista como uma condutância generalizada expressa em unidades de e^2/\hbar . A teoria de escala examina a dependência de $g(L)$ com o comprimento de escala utilizado. Seja $g_0 = g(L_0) = \delta E(L_0)/\Delta E(L_0)$ a condutância generalizada para um sistema composto de caixas acopladas de volume L_0^d . A teoria de escala assume que, dado g_0 em uma escala de comprimento L_0 , podemos obter g numa escala maior $L = L_0 b$. Na nova escala $L_0 b$ a

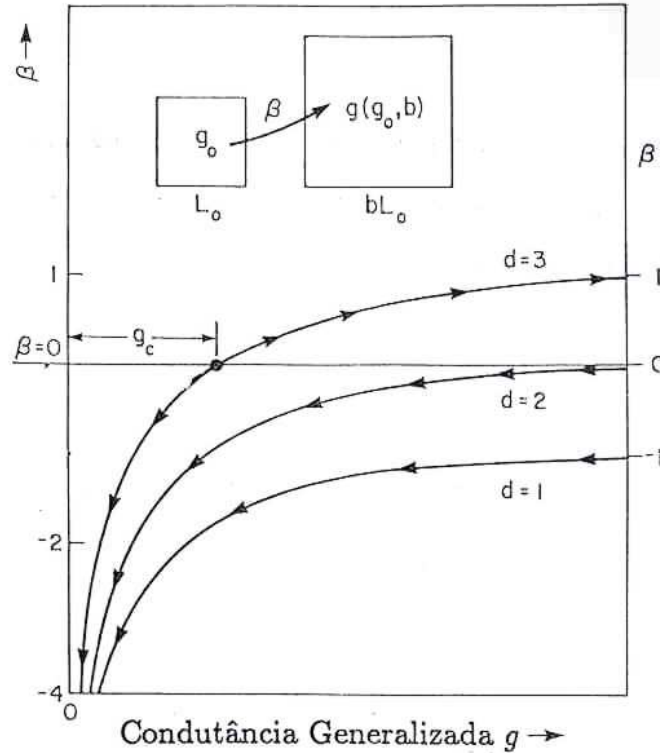


Figura 1.10: O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam

condutância g é completamente determinada pelo valor anterior g_0 e pelo fator de escala b . O comportamento de escala da função g pode ser obtido a partir da função $\beta(g)$

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.20)$$

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. 1.10 para $d = 1, 2$ e 3 .

A curva mostrada na Fig. 1.10 foi proposta por Abrahams *et al*[4]. 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. 1.19 e mostrar que

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.21)$$

Logo, $\beta(\infty)$ é +1 em $d = 3$, 0 em $d = 2$ e -1 em $d = 1$ como mostrado na Fig. 1.10. 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 $e^{-\lambda L}$, onde λ é o coeficiente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização). O acoplamento entre as caixas também decaem exponencialmente com L , de forma que $g(L) \propto e^{-\lambda L}$. Usando a Eq. 1.20 temos

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g \quad (1.22)$$

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 $g \rightarrow 0$ reproduzimos facilmente a Fig. 1.10. A Fig. 1.10 também é chamada, em teoria de grupo de renormalização, de diagrama de fluxo. As setas 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 diminua 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 diminua 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. Uma discussão mais detalhada sobre o modelo de Anderson pode ser encontrada na referência[27].

1.6 O modelo de Anderson com correlações

As previsões do modelo de Anderson, isto é, a existência de estados localizados em $1d$ e $2d$ para qualquer quantidade de desordem e a possibilidade da ocorrência de uma transição metal-isolante em $3d$ têm sido comprovadas tanto através de métodos analíticos como numéricos. A localização dos estados eletrônicos em cadeias uni-dimensionais foi demonstrada analiticamente por K. Ishii[28] e é uma consequência natural do teorema de

Furstenberg sobre produtos de variáveis aleatórias não correlacionadas. Entretanto, uma série de trabalhos têm sido recentemente propostos nos quais a presença de desordem correlacionada e/ou sequências pseudo-aleatórias são responsáveis por um comportamento não usual no modelo de Anderson uni-dimensional.

Em 1976, Theodorou e Cohen[29] mostraram que um modelo *tight binding* uni-dimensional com as amplitudes de hopping aleatórias apresenta um energia crítica, no centro da banda, onde a função de onda é estendida. Entretanto, Fleishman and Licciardello[30] mostraram que a função de onda neste caso tem um comportamento assintótico do tipo $\psi_n \propto e^{-\lambda\sqrt{n}}$. Portanto, apesar do comprimento de localização definido como $1/l_c = -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log \psi_n}{n}$ ser divergente, este estado deve ser considerado como localizado já que o coeficiente de transmissão vai a zero no limite termodinâmico[31].

É bem estabelecido que as propriedades físicas de sistemas incomensuráveis é intermediária entre as propriedades dos sistemas cristalinos e dos materiais amorfos. Entretanto, um potencial incomensurável, apesar de não conter a periodicidade cristalina, é perfeitamente determinístico. Em meados da década de 80 vários trabalhos envolvendo modelos *tight binding* uni-dimensionais 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[32, 33, 34]. 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 todos localizados se $V > 2$ e são todos 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 uni-dimensional e todos os estados são exponencialmente localizados.

Nos últimos dez anos modelos com desordem correlacionada têm despertado um grande interesse da comunidade científica. Em 1989, Flores[6] mostrou que o Hamiltoniano de Anderson uni-dimensional com potencial e amplitude de hopping aleatórios pode apresentar uma energia crítica E_c onde a transmissão da função de onda ocorre (delocalização) se forem introduzidas correlações entre as energias dos sítios e os termos de hopping. 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 *at al*[7] estudaram o Hamiltoniano de Anderson uni-dimensional

para uma liga binária. Na liga binária, as energias dos sítios do sistema podem ser ϵ_a ou ϵ_b com probabilidades q e $1 - q$. Os sítios com energia ϵ_a sempre aparecem em pares. Foi mostrado que se $|\epsilon_a - \epsilon_b| \leq 2t$ onde t é a amplitude de hopping, o sistema apresenta uma energia ressonante onde a função de onda é delocalizada. Em 1992, Bovier[8] estudou o modelo *tight binding* uni-dimensional com distribuição de desordem tipo dímeros. Usando teoria de perturbação foi analisado o comportamento da densidade de estados e do coeficiente de Lyapunov (inverso da largura da função de onda) obtendo resultados semelhantes. Uma série de trabalhos envolvendo correlações tipo dímeros surgiram desde então sempre com os mesmos resultados: Divergência do comprimento de localização em algumas energias críticas[9, 10, 11, 12, 13, 14]. A diferença fundamental entre o modelo de Anderson original e os modelos de dímeros é a existência de correlações nas energias dos sítios. Um argumento analítico que demonstra a existência das energias ressonantes em cadeias binárias[35] pode ser extraído do formalismo de matriz de transferência. Vamos considerar um modelo *tight binding* uni-dimensional com desordem apenas na diagonal. O Hamiltoniano deste modelo pode ser escrito como

$$H = \sum_l V_l |l\rangle\langle l| + t \sum_l [|l\rangle\langle l+1| + |l\rangle\langle l-1|], \quad (1.23)$$

onde $|l\rangle$ é o orbital atômico centrado no sítio i e V_l é um potencial aleatório. Usando a expansão $|\psi\rangle = \sum_l \phi_l |l\rangle$ a equação de Schroedinger pode ser escrita como

$$t\phi_{l+1} + t\phi_{l-1} = (E - V_l)\phi_l. \quad (1.24)$$

Usando técnicas de matriz de transferência esta última equação pode ser escrita como

$$\begin{pmatrix} \phi_{l+1} \\ \phi_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E - V_l) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_l \\ \phi_{l-1} \end{pmatrix}$$

Ou, usando uma redefinição de variáveis, temos

$$\phi_{l+1} = T_l \phi_l \quad (1.25)$$

onde

$$\phi_{l+1} = \begin{pmatrix} \phi_{l+1} \\ \phi_l \end{pmatrix}$$

e

$$T_i = \begin{pmatrix} (E - V_i) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Logo, usando a Eq 1.25 temos que

$$\phi_{l+1} = \prod_{i=0}^l T_i \times \phi_0 \quad (1.26)$$

Então, a quantidade que determina a natureza dos estados eletrônicos é o produto das matrizes de transferência. Vamos agora considerar um modelo com dois diferentes tipos de sítios. O primeiro tipo de sítio, sítio A , tem energia $V_a = V_0$ e sempre aparece em pares. O segundo tipo de sítio, sítio B , tem energia $V_b = W$. Vamos centrar nossa atenção no modo de energia $E = V_0$. Para os sítios do tipo A temos $E - V = 0$. Para esta energia o produto de duas matrizes de transferência é igual a $-I$. Desta forma, os dímeros do tipo A não espalham a função de onda com energia $E = V_0$, mas apenas alteram sua fase.

Recentemente, Cressoni e Lyra[36] estudaram cadeias recozidas onde a correlação entre as energias dos sítios é dada por $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \propto e^{-|i-j|/\xi}$. Foi mostrado que o comprimento de localização cresce com comprimento de correlação ξ , mas todos os estados permanecem localizados dado a ausência de ressonâncias típicas.

Um ponto em comum nestes modelos é o fato que correlações de curto alcance modificam as propriedades eletrônicas do sistema. Na natureza, vários processos estocásticos geram sequências aleatórias com correlações de longo alcance[37]. Estas sequências geralmente têm uma densidade espectral tipo $S(k) \propto k^{-\alpha}$, onde $S(k)$ é a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ e k é o vetor de onda relacionado com as ondulações no potencial. Alguns efeitos da presença de correlações de longo alcance em sistemas desordenados foram recentemente analisados. Em 1994, M. C. Varriale e A. Theumann [38] estudaram um gás de elétrons d -dimensional, em $T = 0$, na presença de potenciais aleatórios com correlações espaciais de longo alcance que decaem com a separação $|x|$ de acordo com uma lei do tipo $|x|^{-d-\sigma}$, onde σ é um parâmetro. Usando um formalismo Lagrangeano e teoria de perturbação foi demonstrado a existência de transição de Anderson em altas dimensões ($d > 4$).

No início de 1998, Russ *et al*[39] estudaram um modelo de Anderson uni-dimensional com correlações de longo alcance na desordem. Neste modelo, a função de correlação é 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.

Neste trabalho analisaremos um modelo de Anderson uni-dimensional com potencial cujo espectro é um lei de potência $S(k) \propto k^{-\alpha}$. Utilizaremos um método de renormalização para estudar a natureza dos autoestados do Hamiltoniano e investigar a possibilidade da ocorrência de uma transição metal-isolante neste modelo.

O restante deste trabalho será organizado da seguinte forma: No capítulo 2, vamos mostrar como gerar sequências com densidade espectral tipo $S(k) \propto k^{-\alpha}$ e desenvolver analiticamente as equações de renormalização que nos permitirão analisar o comportamento do comprimento de localização; No capítulo 3, vamos apresentar nossos resultados e discussões; No capítulo 4, vamos apresentar as conclusões e perspectivas. Finalmente nos apêndices nós apresentaremos o código em fortran utilizado para a renormalização bem como as cópias dos artigos publicados contendo os principais resultados do presente estudo.

Capítulo 2

O modelo de Anderson com correlações de longo alcance

Como verificamos no capítulo passado, diversas variações do modelo de Anderson uni-dimensional têm apresentado resultados diferentes dos usuais. A diferença básica entre estes modelos e o modelo originalmente proposto por Anderson é a existência de correlações de curto alcance na distribuição de energia dos sítios ou na interação entre os íons. Neste capítulo vamos introduzir o modelo de Anderson uni-dimensional com correlações de longo alcance na distribuição de energias dos sítios e posteriormente no termo hopping e desenvolver o formalismo necessário para se estudar a natureza dos estados eletrônicos.

2.1 A correlação de longo alcance

Vários processos na natureza geram sequências aleatórias com correlações de longo alcance. Estas sequências não apresentam um comprimento de escala característico[37] 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 no potencial. Um exemplo típico de sequência com ruído tipo $S(k) = 1/k^\alpha$ pode ser encontrado na sequência dos nucleotídeos da molécula de DNA[15]. De uma forma geral, sistemas

dinâmicos abertos que têm uma tendência natural a evoluir para um estado crítico autorganizável geram sequências com correlações de longo alcance[16]. Para introduzir correlações de longo alcance no nosso modelo vamos escolher as energias dos sítios da rede como sendo uma sequência com ruído $1/k^\alpha$. A sequência escolhida será um movimento Browniano fracionário.

2.1.1 O movimento Browniano fracionário

Mandelbrot[40, 41] introduziu o conceito de movimento Browniano fracionário(MBF) 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

$$\langle B_H(t) - B_H(t_0) \rangle = 0, \quad (2.1)$$

e a variância nos incrementos $V(t - t_0)$ é dada por

$$V(t - t_0) = \langle [B_H(t) - B_H(t_0)]^2 \rangle = 2D\tau(|t - t_0|/\tau)^{2H}, \quad (2.2)$$

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

$$C(t) = \left[\frac{\langle -B_H(-t)B_H(t) \rangle}{B_H(t)^2} \right] = (2^{2H-1} - 1). \quad (2.3)$$

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, independentemente de t . Um movimento Browniano fracionário pode ser *persistente* ($H > 1/2$) ou *antipersistente* ($H < 1/2$). No caso *persistente*, se durante algum tempo no passado os incrementos forem positivos, ou seja a caminhada sofreu crescimento, os incrementos futuros tendem a ser positivos. Conseqüentemente, incrementos negativos no passado implicam em incrementos negativos no futuro. No caso *antipersistente*, o comportamento é contrário, incrementos negativos no passado implicam em incrementos positivos no futuro e vice-versa. Uma discussão mais detalhada sobre MBF pode ser encontrada na referência[42].

2.1.2 Simulando um movimento Browniano fracionário

Nesta seção vamos discutir como gerar uma sequência temporal aleatória $x_i(t)$ que apresente densidade espectral tipo lei de potência ($S(w) = 1/w^\alpha$). A literatura sugere o uso de transformada de Fourier discreta para construir uma série temporal aleatória porém com espectro bem definido[43, 44, 45, 46, 47, 48]. 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 [45]

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(\omega_k) \Delta\omega)^{1/2} \cos(\omega_k t_n + \phi_k). \quad (2.4)$$

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

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} [k^{-\alpha} |\frac{2\pi}{N}|^{1-\alpha}]^{1/2} \cos(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k). \quad (2.5)$$

O parâmetro α controla as correlações desta sequência. Quando $\alpha = 0$ temos uma sequência aleatória, sem correlações entre os eventos (ruído branco), quando $\alpha = 2$ recuperamos o movimento Browniano simples sem correlações entre os incrementos.

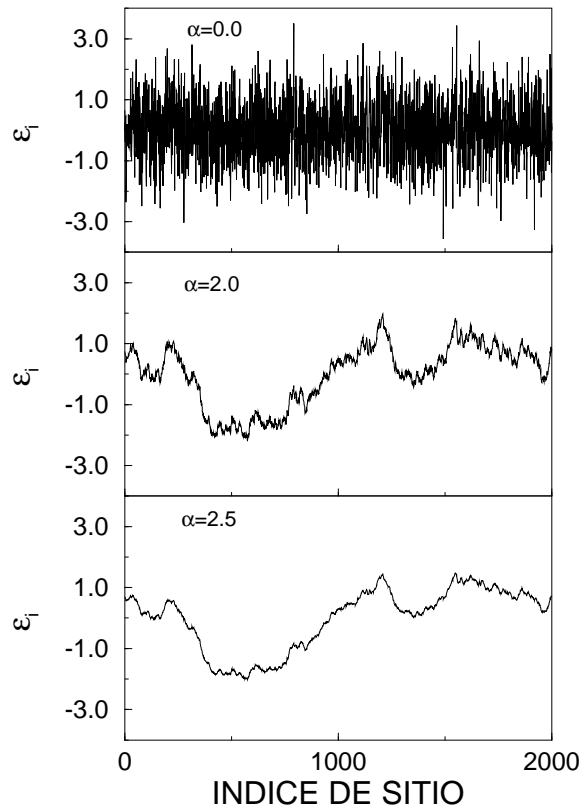


Figura 2.1: Sequências geradas pela Eq. 2.7 com $N = 2000$ e: a) $\alpha = 0.0$ (sequência aleatória sem correlações entre os eventos); b) $\alpha = 2.0$ (traço de um movimento Browniano simples); c) $\alpha = 2.5$ (traço de um movimento Browniano fracionário com incrementos persistentes).

2.2 O modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas energias dos sítios.

O Hamiltoniano de Anderson(1d), que já foi apresentado no capítulo 1, descreve um elétron movendo-se sobre uma cadeia com um único orbital por sítio e interação entre orbitais vizinhos.

$$H = \sum_n \epsilon_n |n \rangle \langle n| + t \sum_n [|n \rangle \langle n + 1| + |n \rangle \langle n - 1|]. \quad (2.6)$$

O ket $|n \rangle$ é o estado de um elétron localizado no orbital n , ϵ_n é o potencial no

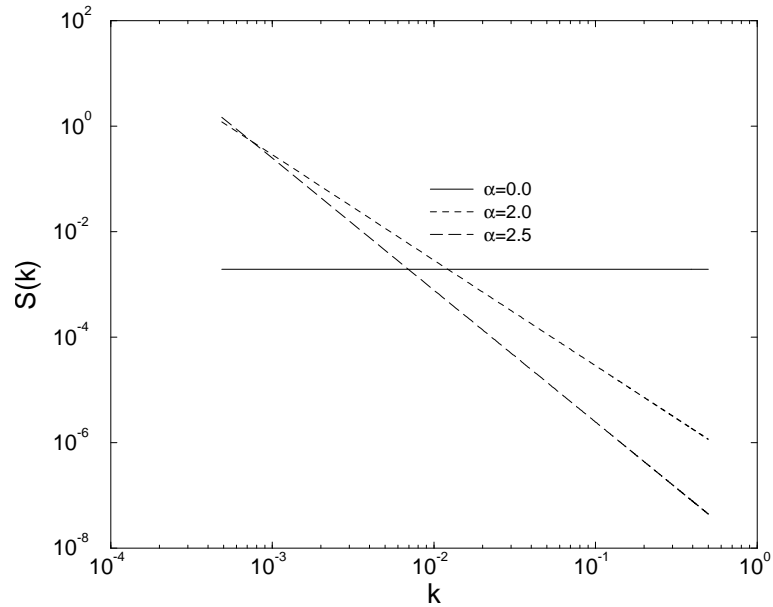


Figura 2.2: A transformada de Fourier da Eq. 2.7, obtida computacionalmente, plotada em escala log-log. Podemos facilmente observar que o espectro apresenta um comportamento tipo lei de potência ($S(k) \propto 1/k^\alpha$) sem ruído nas amplitudes.

sítio n e t é a amplitude de hopping. Vamos usar uma unidade de energia de tal forma que $t = 1$. No modelo de Anderson original as energias sobre os sítios assumem valores aleatórios não correlacionados. Para introduzir correlações de longo alcance na desordem vamos escolher as energias ϵ_n como sendo o traço de um movimento Browniano fracionário previamente definido na seção passada

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^{N/2} [k^{-\alpha} |\frac{2\pi}{N}|^{1-\alpha}]^{1/2} \cos(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k). \quad (2.7)$$

Um gráfico de $\epsilon_n \times n$ é mostrado acima para $\alpha = 0$ (ruído branco), $\alpha = 2$ (movimento Browniano simples), $\alpha = 2.5$ (movimento Browniano fracionário).

A densidade espectral ($S(k) \propto 1/k^\alpha$), para $\alpha = 0$, $\alpha = 2$ e $\alpha = 2.5$ é mostrada acima. A densidade espectral apresenta um comportamento típico de um lei de potência bem definida, em contraste com as sequências reais que apresentam um comportamento

tipo lei de potência com ruído nas amplitudes. Nós esperamos que a presença deste filtro do ruído nas amplitudes não remova nenhum aspecto relevante associado às correlações.

2.2.1 O método de renormalização usando operador de Green.

Para se estudar a natureza dos autoestados do Hamiltoniano vamos usar um método de renormalização. O método é deduzido a partir das equações de movimento para o operador de Green. Para compreender o papel do operador de Green em modelos Hamiltonianos vamos analisar o seguinte exemplo: Suponha que os autoestados de um Hamiltoniano H_0 (Hamiltoniano de referência) são conhecidos

$$H_0|\phi_n \rangle = E_0|\phi_n \rangle. \quad (2.8)$$

Considere agora um segundo Hamiltoniano H definido por

$$H = H_0 + V, \quad (2.9)$$

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 dada por

$$H|\psi_n \rangle = E|\psi_n \rangle. \quad (2.10)$$

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

$$|\psi_n \rangle = |\phi_n \rangle + VG|\phi_n \rangle, \quad (2.11)$$

onde G é o operador de Green associado ao Hamiltoniano

$$G(E) = \frac{I}{E - H}. \quad (2.12)$$

Então, os autoestados de um Hamiltoniano H , onde $H = H_0 + V$ e os autoestados de H_0 são conhecidos, 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[49]. A partir da Eq. 2.12 podemos obter a seguinte igualdade

entre operadores

$$EG(E) = I + HG(E). \quad (2.13)$$

Usando a equação anterior o elemento de matriz l,m pode ser escrito como

$$E \langle l|G(E)|m \rangle = \langle l|I|m \rangle + \langle l|HG(E)|m \rangle. \quad (2.14)$$

Para condensar as equações vamos usar a seguinte notação

$$A_{l,m} = \langle l|A|m \rangle, \quad (2.15)$$

onde A é um operador qualquer. Desta maneira a Eq. 2.14 pode ser escrita da seguinte forma

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

Usando a relação de completeza $\sum_k |k \rangle \langle k| = I$ para abrir o produto $HG(E)$ temos

$$EG_{l,m} = \delta_{l,m} + \sum_k \langle l|H|k \rangle \langle k|G(E)|m \rangle. \quad (2.17)$$

Usando, mais uma vez a notação $\langle l|A|m \rangle = A_{lm}$ temos

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

Sem perda de generalidade vamos escrever as equações de movimento para os elementos $l,0$ do operador de Green

$$EG_{l,0} = \delta_{l,0} + \sum_k H_{l,k} G_{k,0}. \quad (2.19)$$

Precisamos calcular os $H_{l,k}$, elementos de matriz do operador H entre os estados $|l \rangle$ e $|k \rangle$. Como o Hamiltoniano H só tem termos diferente de zero na diagonal principal e nas diagonais secundárias, k só poderá assumir os valores $k = l - 1, l, l + 1$. Usando a Eq. 2.6 para o Hamiltoniano H temos

$$\langle l|H|k \rangle = \epsilon_l \delta_{l,k} + t \delta_{l-1,k} + t^{(0)} \delta_{l+1,k}. \quad (2.20)$$

Para $k = l$ temos

$$\langle l|H|l \rangle = \epsilon_l = H_{l,l}. \quad (2.21)$$

Para $k = l + 1$ temos

$$\langle l|H|l+1\rangle = t = H_{l,l+1}. \quad (2.22)$$

Para $k = l - 1$

$$\langle l|H|l-1\rangle = t = H_{l,l-1}. \quad (2.23)$$

Agora que conhecemos $H_{n,k}$ podemos escrever a equação de movimento para os elementos de matriz do operador de Green

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

O termo $G_{l,0}$ aparece nos dois membros da equação anterior. Agrupando-os temos

$$(E - H_{l,l})G_{l,0} = \delta_{l,0} + H_{l,l-1}G_{l-1,0} + H_{l,l+1}G_{l+1,0}. \quad (2.25)$$

Teremos então, para $l = 0, 1, 2, \dots$ um conjunto infinito de equações acopladas. Este conjunto de equações é apresentado abaixo

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

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

⋮

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

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

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

⋮

Estamos interessados em realizar um processo de dizimação de sítios sobre a cadeia. Após a dizimação de um certo sítio i precisamos renormalizar as energias dos sítios adjacentes ($i-1$ e $i+1$) e o acoplamento entre eles. Vamos compreender como as equações que renormalizam estas quantidades são deduzidas a partir das equações de movimento apresentadas anteriormente. Dizimar um certo sítio i é equivalente a eliminar do conjunto de equações de movimento, o elemento de matriz $G_{i,0}$ associado ao sítio. Por exemplo,

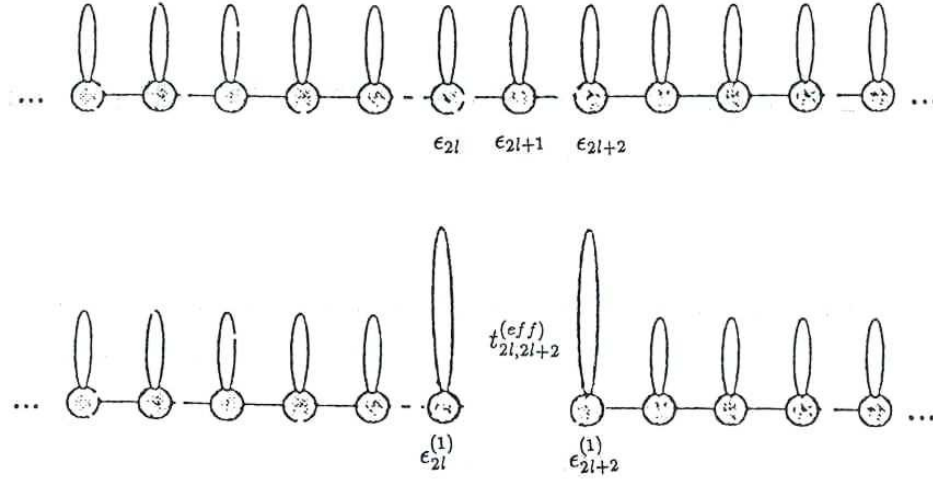


Figura 2.3: Ilustração do processo de dizimação de sítios utilizado nas equações de movimento do operador de Green.

vamos dizimar o sítio $2l + 1$, substituindo a equação de G_{2l+1} na equação de $G_{2l,0}$.

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

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

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

Lembrando que $H_{2l,2l}$ é real e que $H_{2l,2l-1} = H_{2l-1,2l}$ e $H_{2l+1,2l} = H_{2l,2l+1}$ pois as amplitude de hopping entre os sítios vizinhos são reais, podemos escrever a equação anterior como

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

A ilustração da Fig 2.3 mostra o processo de dizimação obtido nas equações acima. Note que após a dizimação a equação de movimento 2.33 mantém sua estrutura original. O coeficiente que aparece no termo $G_{2l,0}$ é a energia do sítio $2l$ renormalizada. O coeficiente

do termo $G_{2l+2,0}$ é o acoplamento efetivo entre o sítio $2l$ e o sítio $2l+2$, após a dizimação do sítio $2l+1$. Lembrando que $H_{2l,2l+1} = t$ e que $H_{2l,2l} = \epsilon_{2l}$ podemos escrever a equação que renormaliza a energia do sítio $2l$ como sendo

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

O índice superescrito (1) indica que apenas um sítio foi dizimado. Através do mesmo procedimento podemos encontrar a equação que renormaliza a energia do sítio $2l+2$ como sendo

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

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

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

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

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

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

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

Onde $\epsilon_0^{(N-1)}(E)$ e $\epsilon_N^{(N-1)}(E)$ representam respectivamente as energias efetivas dos sítios 0 e N após $N-1$ dizimações e $t_{0,N}^{(eff)}(E)$ é o acoplamento efetivo entre os sítios 0 e N .

2.2.2 A natureza dos estados Eletrônicos.

A natureza dos estados eletrônicos quanto a sua extensão pode ser investigada através do cálculo do coeficiente de Lyapunov $\gamma(E)$ que é uma medida do inverso da largura da

função de onda do elétron. Se no limite termodinâmico a largura da função de onda é finita, ou seja, o estado é exponencialmente localizado, o coeficiente de Lyapunov é também finito. Entretanto, se a função de onda for estendida, o coeficiente de Lyapunov deve ir a zero no limite termodinâmico. Em função dos elementos de matriz do operador de Green, o coeficiente de Lyapunov pode ser escrito como[50]

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

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

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

Invertendo o operador $E - H^{(eff)}$ podemos mostrar que:

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

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

Logo, substituindo as duas equações anteriores na Eq. 2.40 teremos:

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

No limite de $N \rightarrow \infty$, o termo $\frac{1}{N} \ln (E - \epsilon_0^{(N-1)})$ tende a zero uma vez que a energia renormalizada é finita. Portanto, fica assim estabelecida uma relação entre $\gamma(E)$ e $t_{0,N}^{(eff)}(E)$

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

Desta forma, o procedimento de renormalização permite o cálculo direto do coeficiente de Lyapunov. $\gamma(E)$ pode ser obtido através de uma regressão linear da quantidade

mos resolver. Usando o método de cofatores podemos mostrar que os polinômios $g_i(\lambda)$ obedecem a seguinte relação de recorrência

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

para $i = 1, 2, \dots, N$. O teorema de Sturm estabelece que se a e b são dois números reais e $b > a$, o número de soluções da equação $g_N(\lambda) = 0$ (equação secular) dentro do intervalo $a \leq \lambda < b$ é igual a $\rho(b) - \rho(a)$ onde $\rho(\xi)$ é o número de variações de sinal entre consecutivos termos da sequência $g_0, g_1(\xi), g_2(\xi), \dots, g_N(\xi)$. Portanto, podemos obter a densidade de estados integrada (IDOS) como sendo

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

Para obter o número de variações de sinal entre consecutivos termos da sequência de polinômios $g_i(\lambda)$ vamos reescrever a relação de recorrência 2.46 como

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

onde $h_i(\lambda) = g_i(\lambda)/g_{i-1}(\lambda)$. Podemos obter todos os termos da sequência $h_0, h_1(\lambda), h_2(\lambda), \dots, h_N(\lambda)$ executando a relação de recorrência 2.48 no computador. As mudanças de sinal entre 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.

2.3 O modelo de Anderson com correlações de longo alcance no hopping

Outra variação bastante interessante do modelo de Anderson uni-dimensional é considerar uma cadeia com todos os íons idênticos porém distribuídos de forma tal que a integral de transferência seja aleatória. Neste trabalho vamos também estudar as propriedades eletrônicas de um Hamiltoniano *tight binding* uni-dimensional com desordem correlacionada nas integrais de transferência. O Hamiltoniano do modelo de Anderson com correlação de longo alcance na amplitude de hopping é

$$H = \epsilon \sum_n |n\rangle\langle n| + \sum_n t_n [|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|]. \quad (2.49)$$

Onde os valores de t_n serão escolhidos como tendo a mesma decomposição de Fourier da Eq. 2.7 porém com normalização diferente. Se normalizarmos a média das amplitudes de hopping a zero ($\langle t_n \rangle = 0$) existe uma grande possibilidade de que, para uma dada distribuição de desordem, a cadeia apresente segmentos desconexos. Para evitar isto, vamos escolher $\langle t_n \rangle = 4$ e $\Delta t_n = \sqrt{\langle t_n^2 \rangle - \langle t_n \rangle^2} = 1$. Sem perda de generalidade, vamos usar $\epsilon = 0$. Para se estudar a natureza dos estados eletrônicos, vamos aplicar o mesmo método de dizimação desenvolvido na seção 2.2.1. As equações que renormalizam as energias dos sítios e a amplitude de hopping são, neste caso,

$$\epsilon_0^{(N)}(E) = \epsilon_0^{(N-1)}(E) + t_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t_{0,N-1}^{(eff)} \quad (2.50)$$

$$\epsilon_N^{(N-1)}(E) = \epsilon_N^{(N)}(E) + t_{N-1,N} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t_{N-1,N} \quad (2.51)$$

$$t_{0,N}^{(eff)}(E) = t_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t_{N-1,N} \quad (2.52)$$

A densidade de estados para este Hamiltoniano pode ser obtida seguindo o mesmo procedimento da seção 2.2.3.

Capítulo 3

Resultados e Discussões

Neste capítulo vamos apresentar os resultados de nosso estudo sobre a natureza dos estados eletrônicos das variantes estudadas do modelo de Anderson uni-dimensional com correlações de longo alcance. Na seção 3.1 apresentaremos os resultados para o modelo de Anderson com desordem diagonal e correlações de longo alcance. Na seção 3.2 apresentaremos os resultados para o modelo de Anderson com desordem nas integrais de transferência as quais também apresentam correlação de longo alcance em sua distribuição.

3.1 O modelo de Anderson com correlações de longo alcance entre as energias dos sítios

Como mostramos no capítulo anterior, a natureza dos estados eletrônicos será investigada basicamente através do estudo do comportamento do coeficiente de Lyapunov obtido através de um processo de renormalização dos elementos de matriz do operador de Green associado ao Hamiltoniano. O processo consistiu em reduzir a cadeia a apenas dois sítios (sítio 0 e sítio N) através de um método de dizimação iterativa.

A partir das equações de movimento para os elementos de matriz do operador de Green obtivemos as equações que renormalizam as energias dos dois sítios restantes e a interação entre eles. Estas equações foram deduzidas no capítulo 2 e serão reapresentadas

agora na seguinte notação

$$\epsilon_0^{(N-1)}(E) = \epsilon_0^{N-2}(E) + t_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t_{0,N-1}^{(eff)} \quad (3.1)$$

$$\epsilon_N^{(N-1)}(E) = \epsilon_N + t \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t \quad (3.2)$$

$$t_{0,N}^{(eff)}(E) = t_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t \quad (3.3)$$

O coeficiente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização da função de onda do elétron) está relacionado com a amplitude de hopping efetiva através da equação

$$\gamma(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln \left| \frac{G_{N,N}(E)}{G_{0,N}(E)} \right| \right] \quad (3.4)$$

$$= -\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln |t_{0,N}^{(eff)}(E)| \right]. \quad (3.5)$$

Usando as equações 3.1 e 3.2 podemos dizimar a cadeia, obtendo assim a amplitude de hopping efetiva entre os dois sítios restantes. O coeficiente de Lyapunov é obtido fazendo-se uma regressão linear de $\ln t_{0,N}^{(eff)}$ versus N . O programa em fortran para realizar as dizimações pode ser encontrado no apêndice A.1. Para o estudo do coeficiente de Lyapunov é importante estabelecer a banda de energias permitidas ao elétron nesta cadeia. No capítulo 2, usando o método de Dean, mostramos que a densidade de estados integrada (IDOS) é igual ao número de valores negativos da sequência $h_i(E)$ (para $i = 1, 2, \dots, N$). As funções $h_i(E)$ obedecem a seguinte relação de recorrência

$$h_i(E) = (\epsilon_i - E) - t^2/h_{i-1}(E), \quad (3.6)$$

onde $i = 1, 2, \dots, N$.

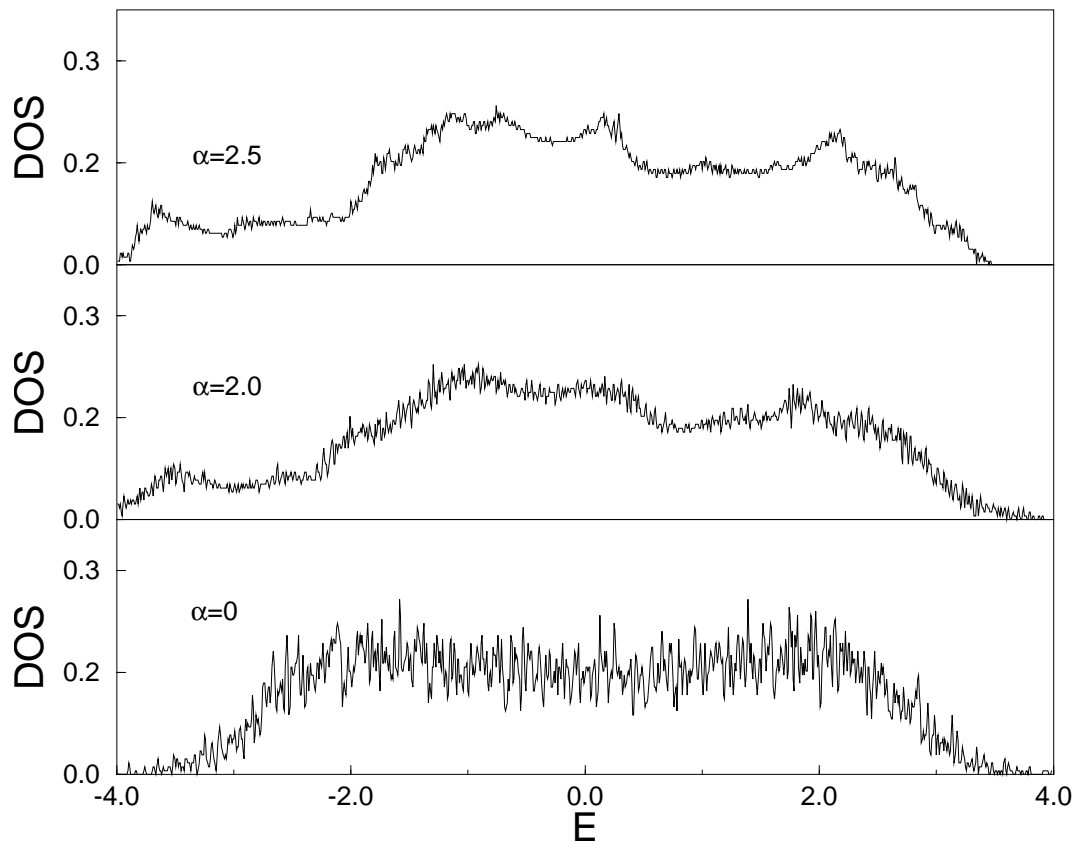


Figura 3.1: Densidade de estados(DOS) versus energia E para cadeias de 10000 sítios com correlações de longo alcance na distribuição de desordem. A densidade de estados(DOS) torna-se menos rugosa quando α é grande e a normalização imposta no potencial faz com que a largura da banda de energia fique independente de α .

Usando esta última equação podemos facilmente obter a densidade de estados integrada(IDOS) e após uma simples derivada computacional, a própria densidade de estados(DOS). A Fig. 3.1 apresenta a densidade de estados para cadeias de 10000 sítios e diferentes parâmetros de correlação α . Observe que a densidade de estados encontra-se concentrada na faixa de energias $-4 < E < 4$ para qualquer valor do parâmetro de correlação α . Fora desta faixa, a densidade de estados decaí exponencialmente. Note que a densidade de estados(DOS) torna-se menos rugosa quando α é grande. Este fato, tem sido relacionado em alguns trabalhos com a presença de estados delocalizados embora não seja suficientemente preciso [52].

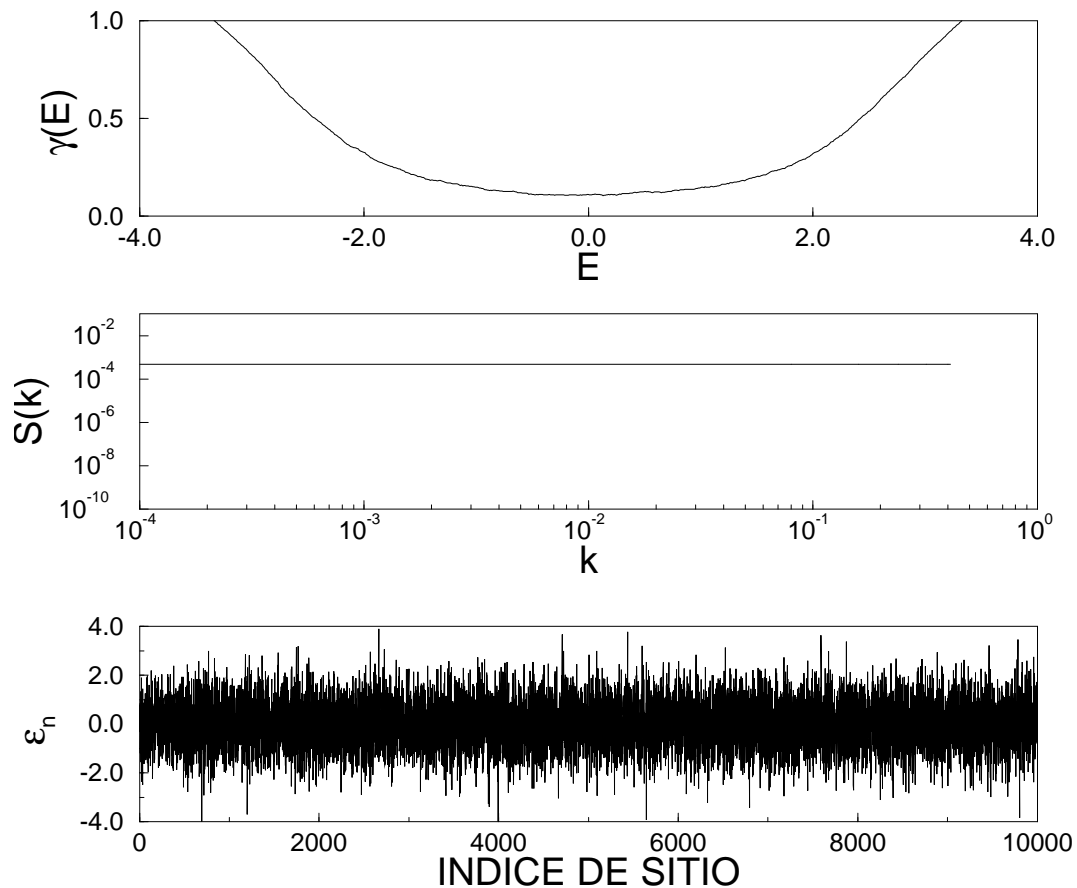


Figura 3.2: De baixo para cima temos uma distribuição de desordem não correlacionada ($\alpha = 0.0$), sua densidade espectral e o coeficiente de Lyapunov versus energia E . A cadeia tem 10000 sítios. Observe que $\gamma(E)$ é sempre diferente de zero, e portanto, as funções de onda são exponencialmente localizadas para qualquer energias dentro da banda.

Agora que conhecemos a largura da banda de energias permitidas ao elétron, vamos obter o coeficiente de Lyapunov para cadeias com diversos tamanhos e parâmetros de correlação α . Na Fig. 3.2 apresentamos o coeficiente de Lyapunov versus energia E , o potencial ϵ_n e sua densidade espectral. Consideramos cadeias de 10000 sítios e desordem sem correlação ou seja, $\alpha = 0.0$. Podemos observar que o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero para $\alpha = 0.0$, o que implica em funções de onda exponencialmente localizadas para qualquer energia dentro da banda. Vamos comparar este resultado com o obtido para o modelo de Anderson original onde as energias dos sítios são aleatoriamente

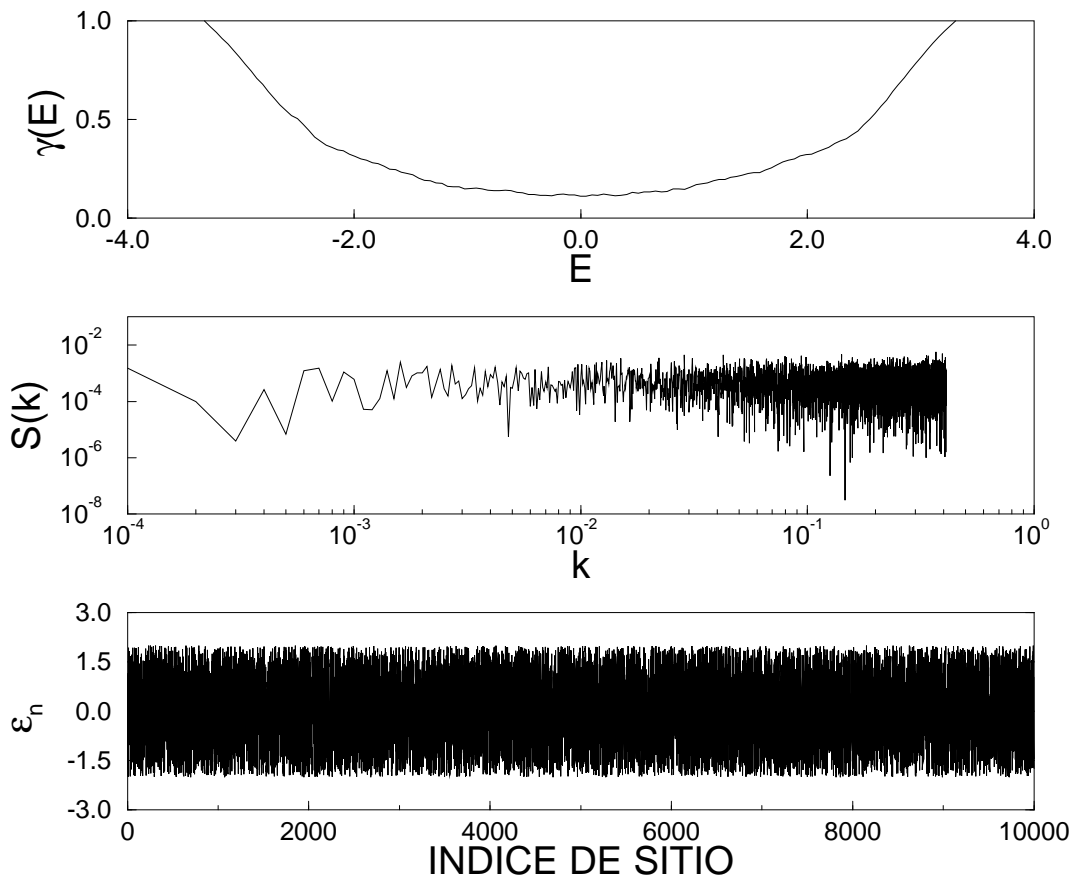


Figura 3.3: De baixo para cima temos uma distribuição de desordem aleatoria, sua densidade espectral e o coeficiente de Lyapunov versus energia E . A cadeia tem 10000 sítios. Observe que o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero

escolhidas de forma que sua decomposição de Fourier apresenta ruído tanto nas fases como nas amplitudes. A Fig. 3.3 apresenta $\epsilon_n \times n$, sua densidade espectral e o coeficiente de Lyapunov versus energia. O algoritmo computacional para obter $\gamma(E)$ é o mesmo que vem sendo usado, mudando apenas a distribuição de energia dos sítios. O coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero, e portanto as funções de onda são exponencialmente localizadas como já esperado para modelos uni-dimensionais desordenados sem correlação. De acordo com a nossa suposição, a ausência do ruído nas amplitudes não influencia nas propriedades de localização. Vamos agora investigar o comportamento do sistema na presença de correlações de longo alcance.

Inicialmente vamos calcular o coeficiente de Lyapunov para cadeias com sequências de incrementos antipersistentes. A Fig. 3.4 mostra o coeficiente de Lyapunov para cadeias de 5000, 10000 e 20000 sítios com parâmetro de correlação $\alpha = 1$. O coeficiente de Lyapunov não apresenta nenhuma dependência com o número de sítios pois acontece uma perfeita superposição das curvas obtidas para diferentes comprimentos da cadeia. Em outras palavras, os resultados obtidos para cadeias finitas podem ser considerados como representativos do comportamento no limite termodinâmico. O coeficiente de Lyapunov continua diferente de zero para qualquer energia dentro da banda. Este comportamento é observado para qualquer α dentro do intervalo $0 < \alpha < 2$. Portanto, podemos concluir que mesmo existindo correlações na sequência de energias dos sítios, as funções de onda do elétron continuam exponencialmente localizadas se a sequência de energias tiver incrementos antipersistentes.

Para o caso de uma distribuição de desordem semelhante ao traço de um movimento Browniano simples ($\alpha = 2.0$), o coeficiente de Lyapunov se anula em uma única energia crítica E_c como pode ser observado na Fig. 3.5. Nas vizinhanças de E_c o coeficiente de Lyapunov anula-se obedecendo uma lei de potência $\gamma \propto |E - E_c|^\nu$ com $\nu = 2.0$. Note que este é um caso limite no qual os incrementos na sequência de energias são não correlacionados. A título de comparação vamos analisar a seguinte distribuição de desordem: $\epsilon_n = \epsilon_{n-1} + \phi$, onde ϕ é uma variável aleatória cuja distribuição é tal que $\langle \epsilon_n \rangle = 0.0$ e $\langle \epsilon_n^2 \rangle = 1.0$. Esta distribuição de desordem descreve o traço de um movimento Browniano simples cujo espectro apresenta ruído tanto nas fases como nas amplitudes. A Fig. 3.6 mostra $\epsilon_n \times n$ após a normalização conveniente, sua densidade espectral e o coeficiente de Lyapunov. Observe que o coeficiente de Lyapunov é nulo em uma única energia crítica E_c . Este resultado está de acordo com o caso anterior para $\alpha = 2$ mostrando mais uma vez que o ruído nas amplitudes não desempenha nenhum papel fundamental com relação a localização ou não da função de onda.

Como podemos observar o caso $\alpha = 2.0$ (sequências com incrementos não correlacionados) representa um caso limite onde a função de onda é delocalizada para uma única energia. Este fato pode ser um indício de que cadeias com sequência de energias com incrementos persistentes possam suportar a presença de estados delocalizados. Para investigar esta possibilidade nós mostramos na Fig. 3.7 o coeficiente de Lyapunov para cadeias de 5000, 10000 e 20000 sítios e parâmetro de correlação $\alpha = 2.5$. Observamos a existência de uma faixa de energias onde o coeficiente de Lyapunov é zero, isto é, existe uma fase de estados estendidos perto do centro da banda. Esta fase de estados estendidos

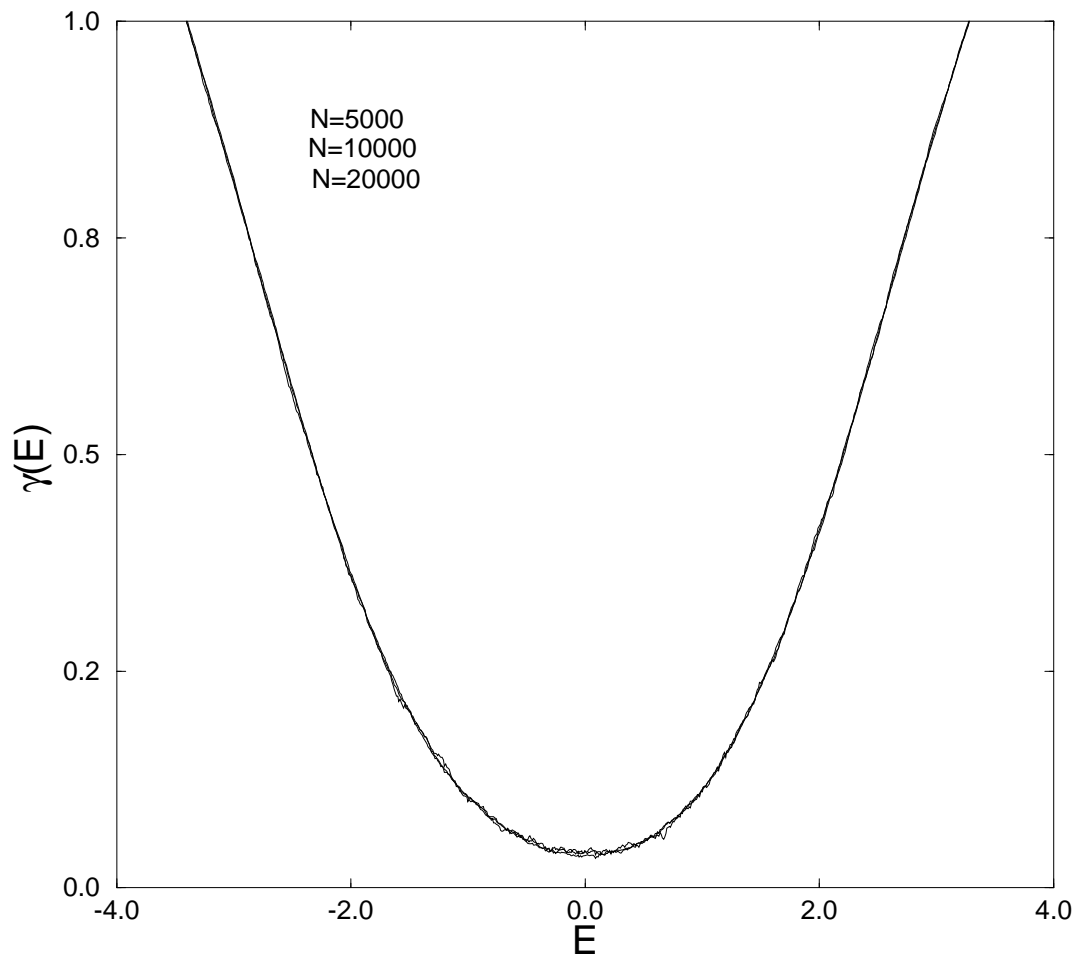


Figura 3.4: Coeficiente de Lyapunov versus energia E para cadeias de 5000, 10000 e 20000 sítios e parâmetro de correlação $\alpha = 1$. Mesmo existindo alguma correlação entre as energias dos sítios, as funções de onda do elétron continuam exponencialmente localizadas.

encontrada para $\alpha = 2.5$ é um resultado que merece ser analisado de forma mais detalhada. Inicialmente é importante notar que se a fase de estados delocalizados for produto de efeitos de tamanho finito, esta não deve permanecer no limite termodinâmico. É importante ressaltar que na década de sessenta alguns experimentos apontavam a existência de uma transição metal-isolante no modelo de Anderson bi-dimensional, quando estavam apenas observando efeitos de tamanho finito. Observe entretanto que nossos resultados para diferentes tamanhos apresentam uma superposição perfeita. Este resultado numérico

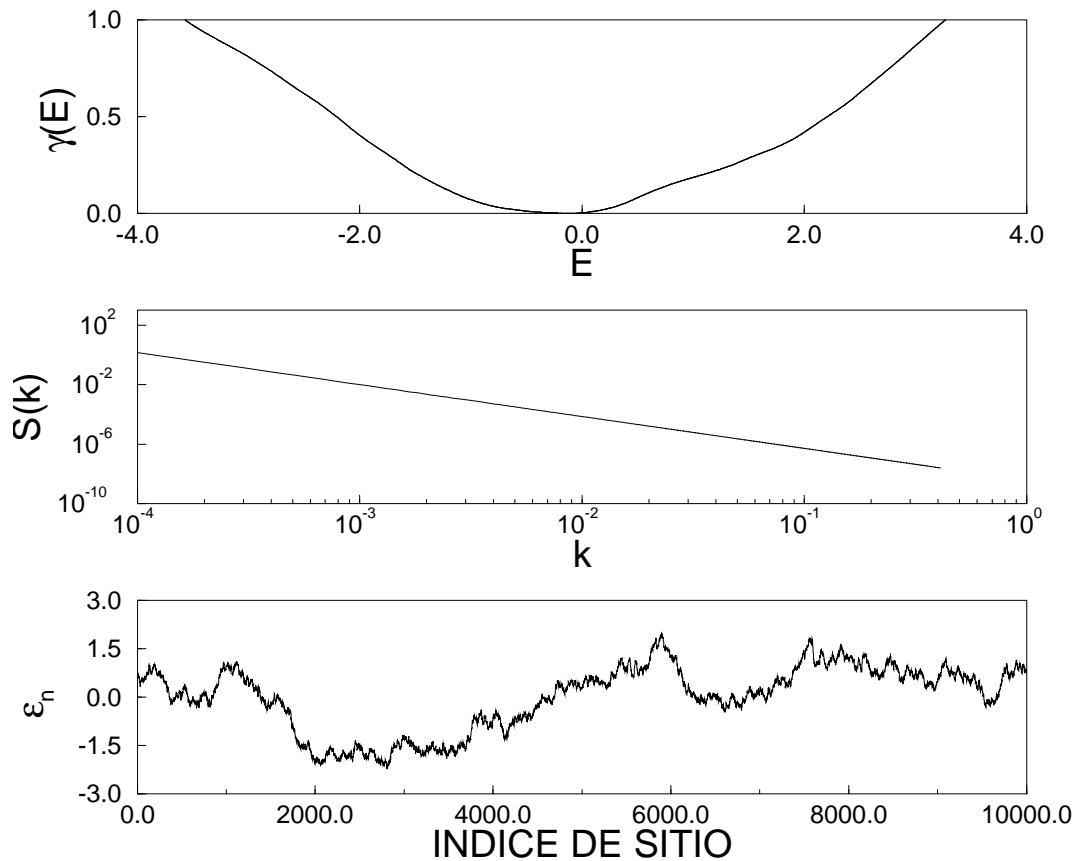


Figura 3.5: De baixo para cima temos uma distribuição de desordem tipo traço de um movimento Browniano simples, sua densidade espectral e o coeficiente de Lyapunov versus energia E . A cadeia tem 10000 sítios. Observe que o coeficiente de Lyapunov continua diferente de zero a menos de uma energia perto do centro da banda.

é um forte suporte para a hipótese de que uma fase de estados delocalizados é estável na presença de correlações de longo alcance na distribuição de energias dos sítios. Para qualquer sequência de energias com incrementos persistentes ($\alpha > 2$) existe uma faixa de energias onde $\gamma(E) = 0.0$. Este resultado pode ser claramente observado na Fig. 3.8.

Para ilustrar o comportamento do sistema nas duas fases vamos apresentar o hopping efetivo $t_{0n}^{(eff)}$ versus o número de sítios dizimados. A Fig. 3.9 mostra $t_{0n}^{(eff)} \times n$ para uma energia $E = -0.3$. A cadeia tem 10000 sítios e consideramos parâmetros de correlação $\alpha = 0.0$ e 2.5. Na fase localizada o hopping efetivo apresenta um decaimento exponencial enquanto que na fase estendida apresenta uma oscilação porém conserva a

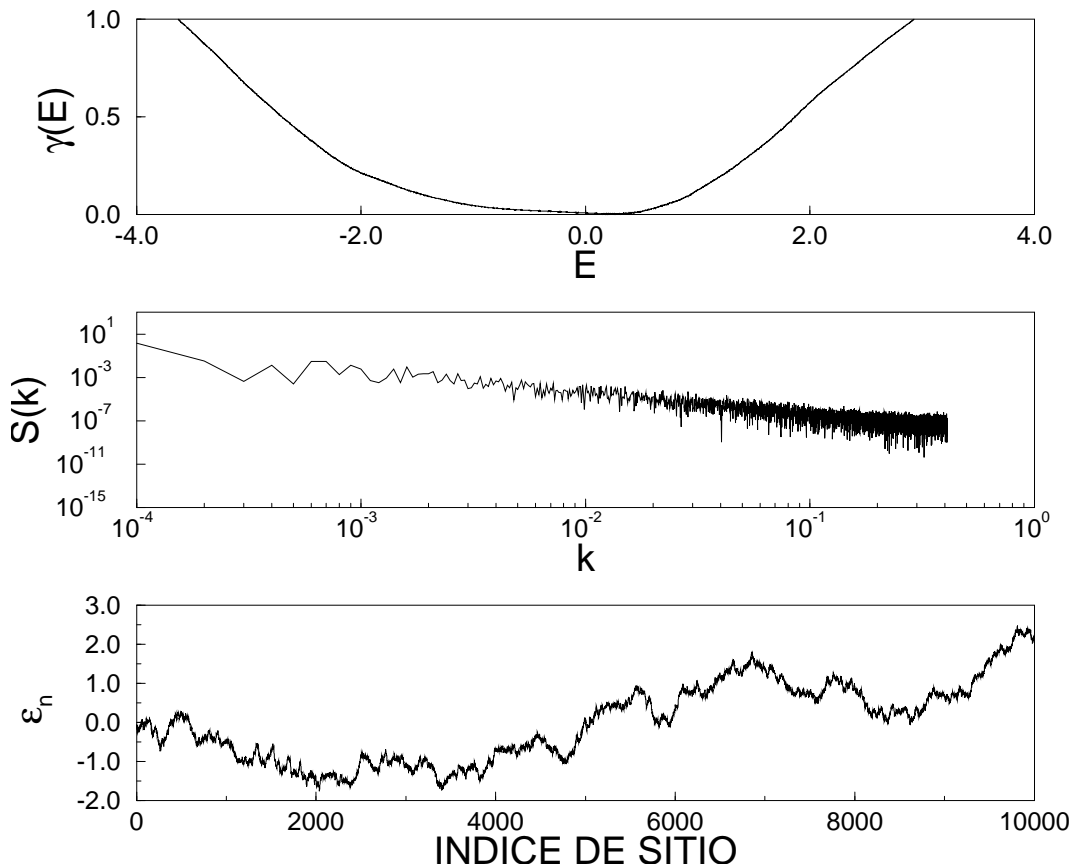


Figura 3.6: De baixo para cima temos uma distribuição de desordem tipo traço de um movimento Browniano simples, sua densidade espectral e o coeficiente de Lyapunov versus energia E em uma cadeia de 10000 sítios. Observe que o coeficiente de Lyapunov para esta cadeia é também nulo em uma única energia crítica E_c concordando assim, com os resultados para $\alpha = 2$.

conexão entre os sítios.

O diagrama de fases deste modelo pode ser obtido através do cálculo de $\gamma(E)$ para vários valores de α e consequente localização da posição das energias críticas. Nós estimamos a energia crítica como sendo a energia na qual o coeficiente de Lyapunov torna-se menor que $1/N$ onde N é o comprimento da cadeia. A Fig. 3.10 mostra o diagrama de fases no plano $(E/t, \alpha)$ para cadeias com $\Delta\epsilon/t = 1$. Observe que a faixa de energias correspondente a estados estendidos cresce com α . A largura da fase de estados estendidos tem seu valor saturado em $\alpha \rightarrow \infty$. Para grandes valores de α o coeficiente de Lyapunov

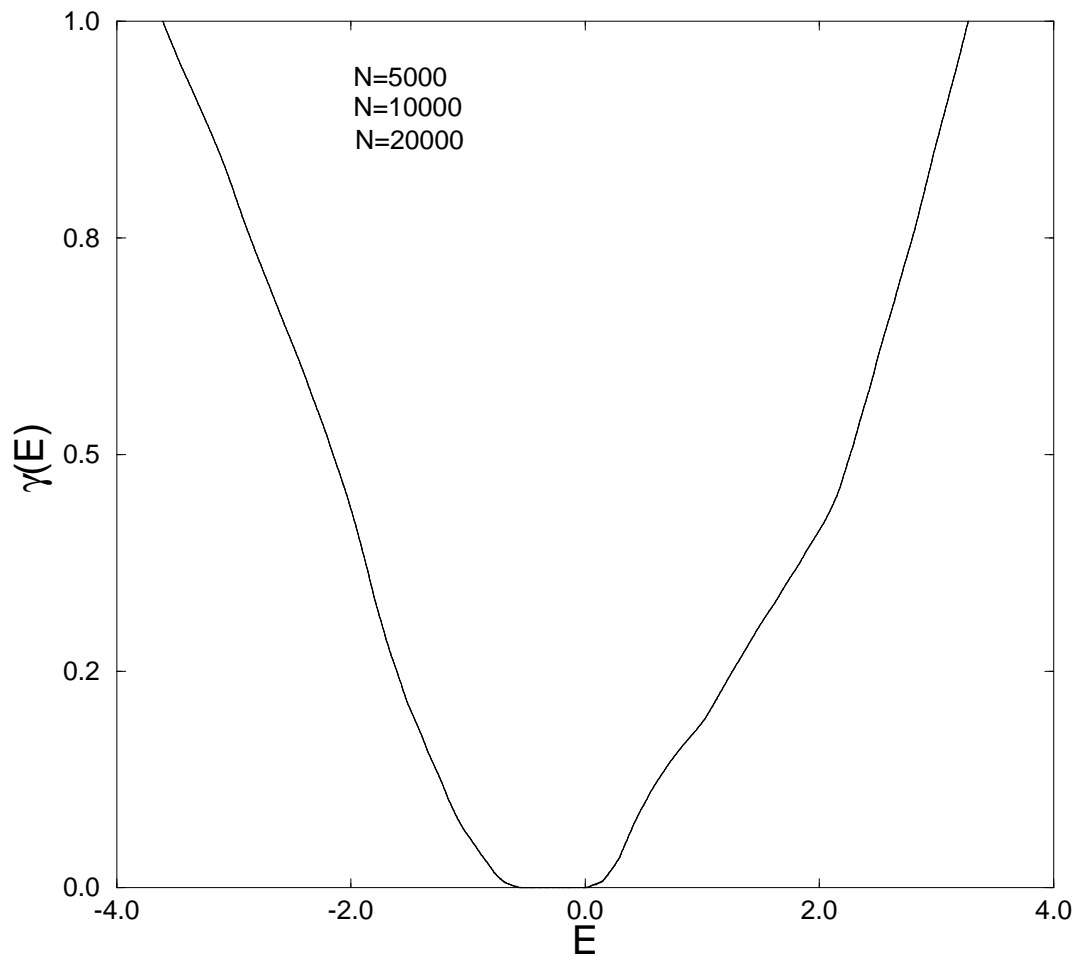


Figura 3.7: Coeficiente de Lyapunov versus energia E para cadeias de 5000 ,10000 e 20000 sítios e distribuição de desordem com $\alpha = 2.5$ ou seja, traço de uma movimento Browniano fracionário. Observe a existência de uma faixa de energias onde a função de onda do elétron é delocalizada.

decrece a zero de forma linear nas proximidades de E_c ($\gamma = |E - E_c|^1$) como pode ser observado na Fig. 3.8a. O padrão assimétrico do diagrama de fases é uma característica inerente à sequência de energias utilizada. Esta assimetria poderia ser removida após uma média configuracional. Entretanto, uma série de trabalhos recentes questionam o significado físico de médias configuracionais em sistemas desordenados com correlações de longo alcance dado a presença de fortes flutuações entre as amostras [53].

Em resumo, nós encontramos que o modelo de Anderson(1d) com correlações de

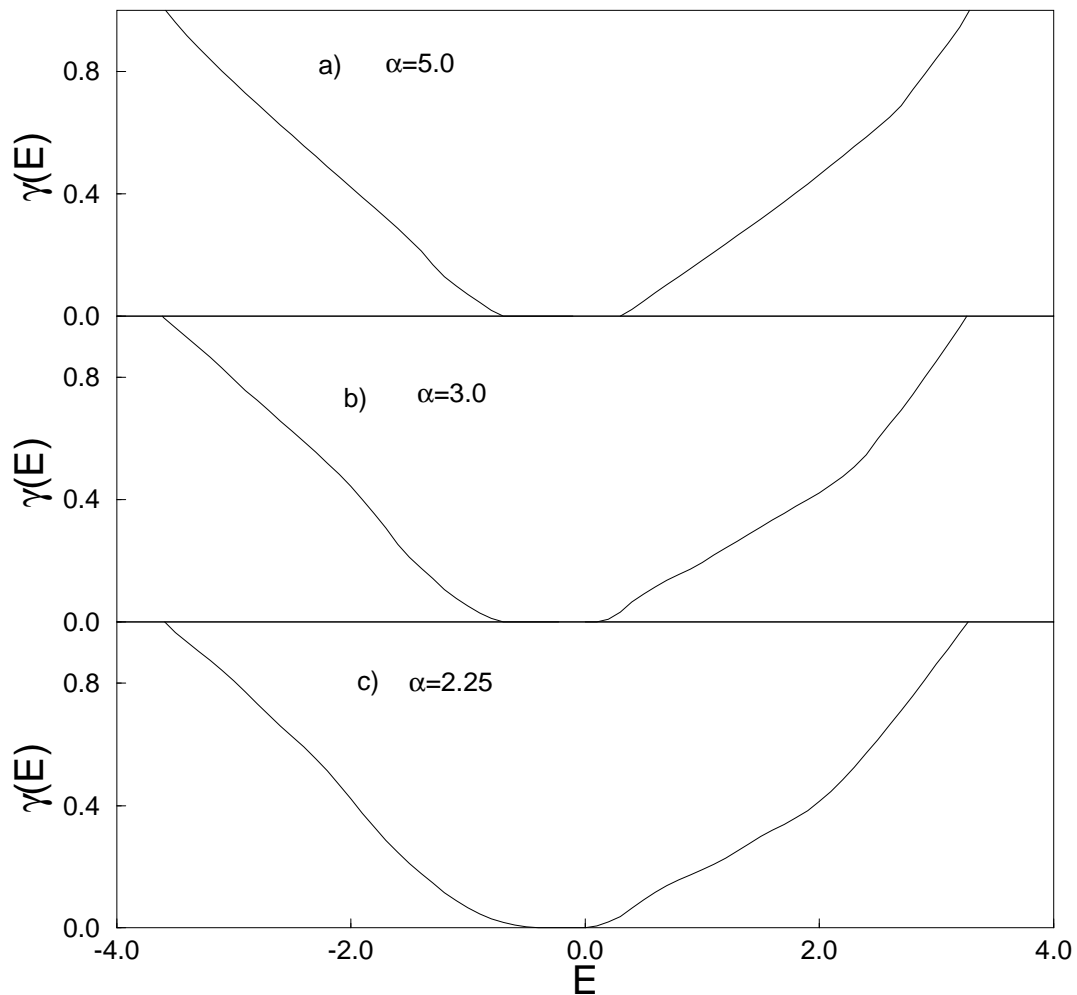


Figura 3.8: Coeficiente de Lyapunov versus energia E para cadeias de 10000 sítios e a) $\alpha = 5.0$. b) $\alpha = 3.0$. c) $\alpha = 2.25$. Encontramos sempre uma fase de estados estendidos para qualquer $\alpha > 2$.

longo alcance na distribuição de desordem apresenta uma fase de estados estendidos quando $\alpha > 2$ ($H > 1/2$), isto é, quando a sequência de energia dos sítios apresenta incrementos persistente. Nosso modelo exibe uma verdadeira transição de Anderson com energias críticas (*mobility edges*), estáveis no limite termodinâmico, separando as fases de estados localizados e estendidos, em contraste com os modelos de correlação tipo dímeros onde foi observado delocalização somente em algumas energias ressonantes. Neste sentido

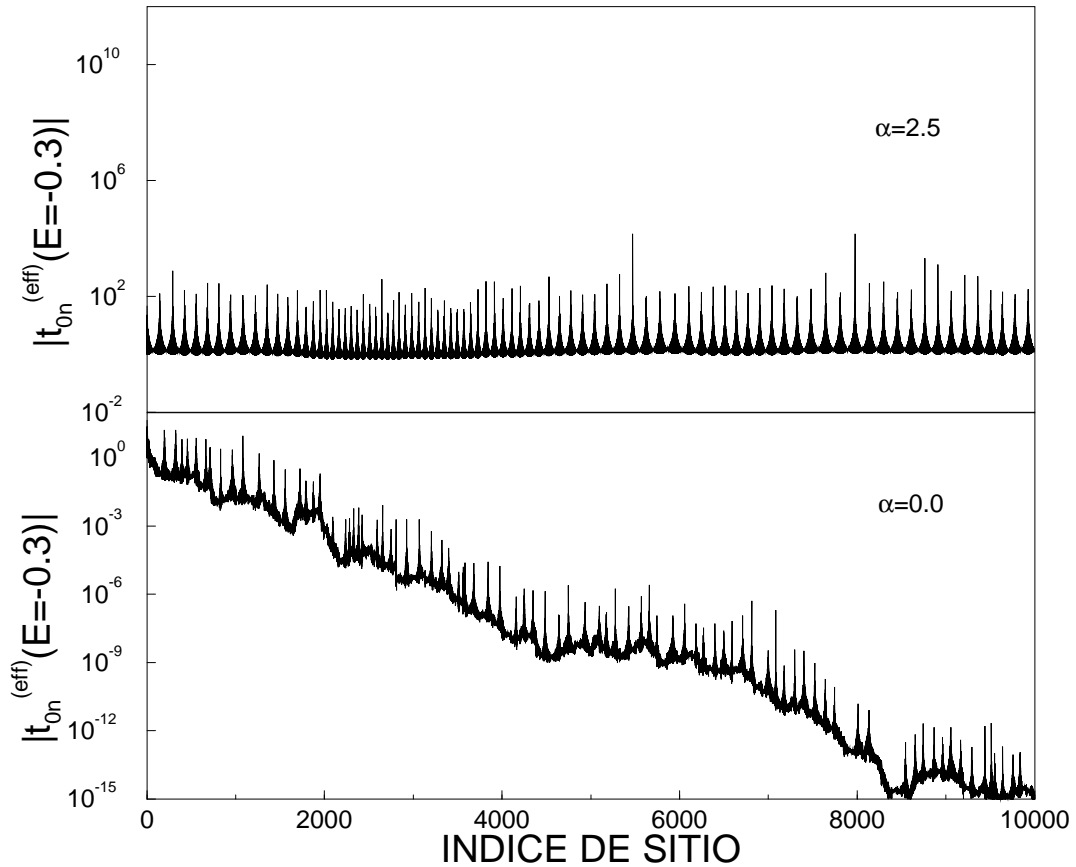


Figura 3.9: Parâmetro de interação efetiva ($t_{0N}^{(eff)}$) versus n para cadeias de 10000 sítios e parâmetros de correlação $\alpha = 0.0$ e 2.5 . Para calcular o hopping efetivo fixamos a energia em $E = -0.3$ (em unidades de t). Observe que o hopping efetivo decaí exponencialmente com n para $\alpha = 0.0$, caracterizando assim um estado localizado. Para $\alpha = 2.5$, o hopping efetivo oscila sem decair. Portanto, como não houve redução de interação, o elétron pode mover-se por toda cadeia (estado delocalizado).

nosso modelo tem um comportamento semelhante ao obtido para cadeias com potenciais determinísticos porém incomensuráveis com a rede [50].

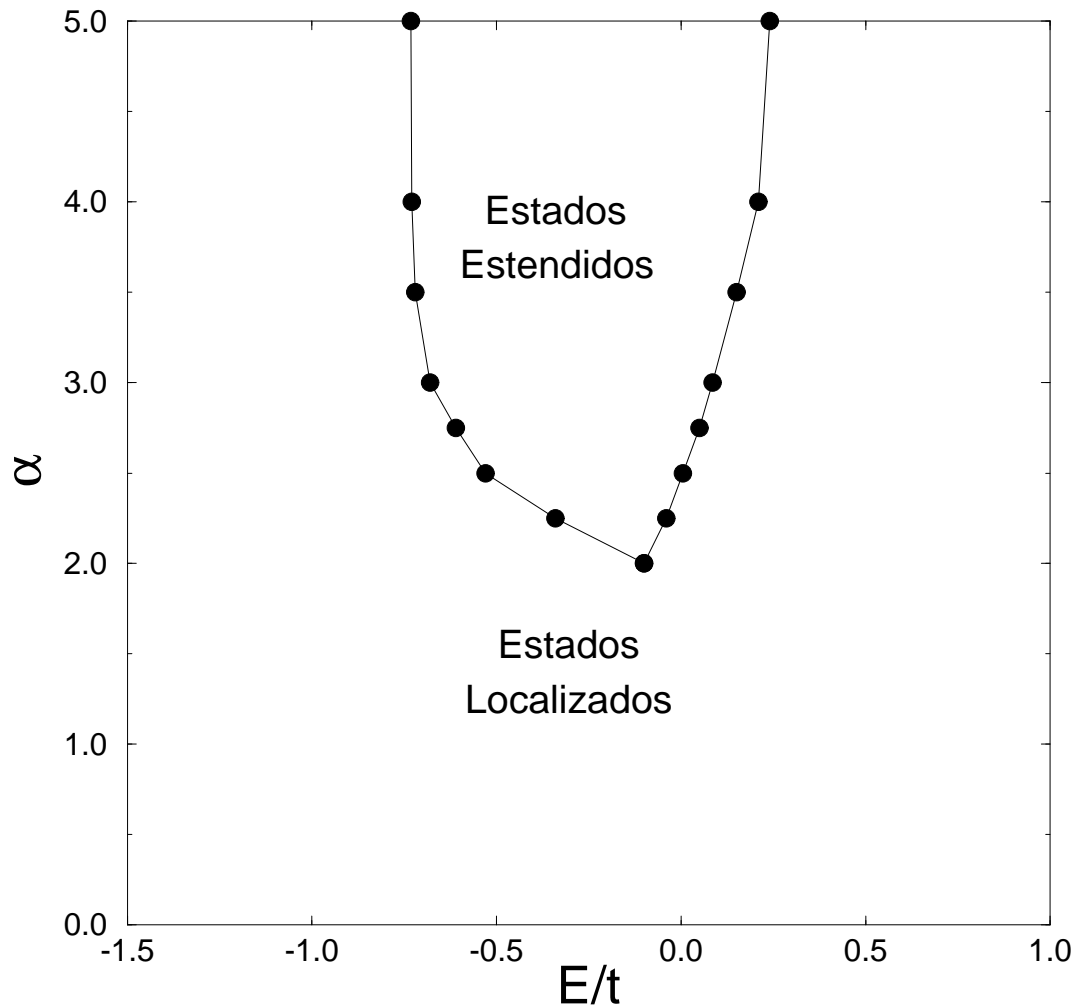


Figura 3.10: Diagrama de fase no plano $(E/t, \alpha)$ para cadeias com $\Delta\epsilon/t = 1$ e 10000 sítios. A largura da fase de estados estendidos, que aparece quando $\alpha > 2$, satura quando $\alpha \rightarrow \infty$.

3.2 Modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping

Neste trabalho estudamos também uma segunda variante do modelo de Anderson que consiste de um modelo *tight binding* uni-dimensional com desordem nas integrais de transferência. O Hamiltoniano para o modelo de Anderson uni-dimensional com correlações

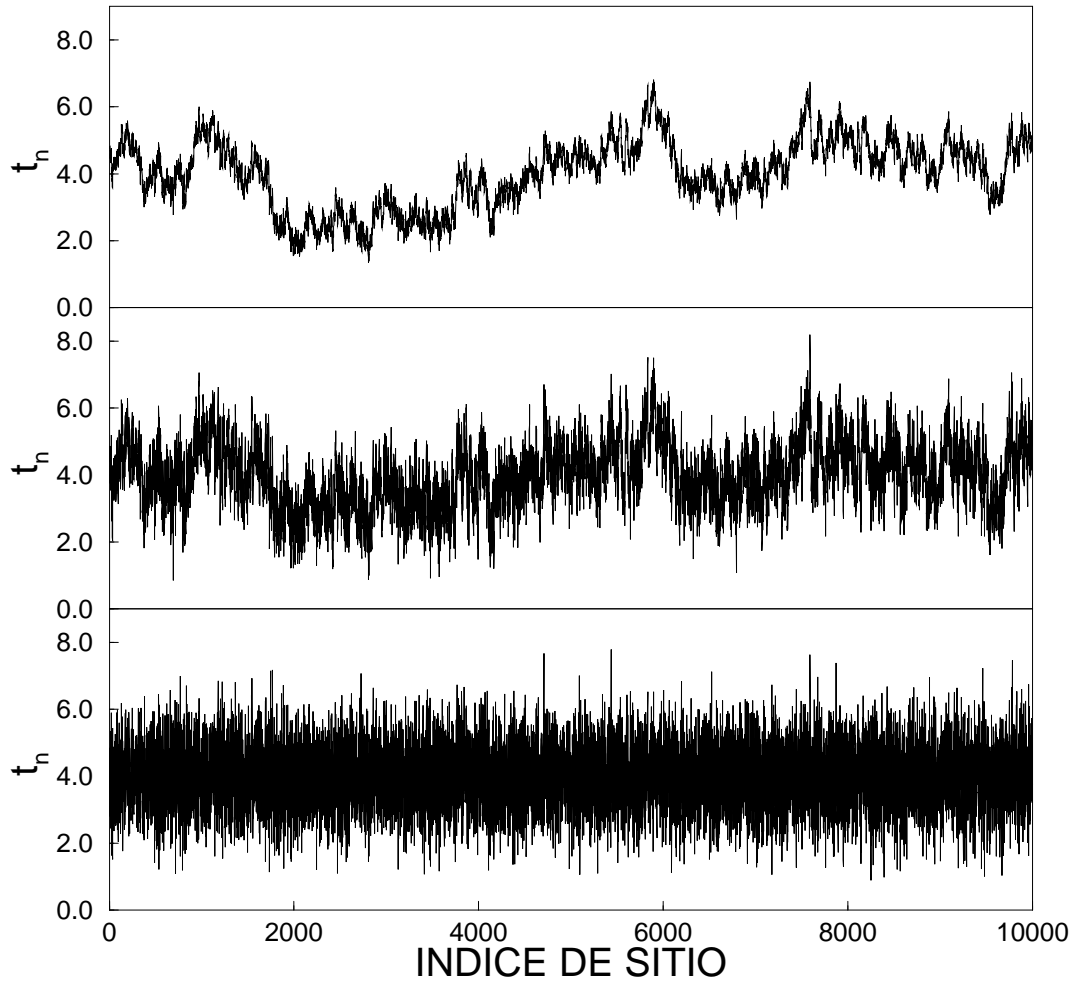


Figura 3.11: Amplitudes de hopping com correlações de longo alcance em cadeias de 10000 sítios com $\alpha = 0, 1$ e 1.5 .

de longo alcance nas amplitudes de hopping é mostrado abaixo

$$H = \epsilon \sum_n |n \rangle \langle n| + \sum_n t_n [|n \rangle \langle n+1| + |n-1 \rangle \langle n|] \quad (3.7)$$

onde t_n é dado por

$$t_n = \sum_{k=1}^{N/2} [k^{-\alpha} (\frac{2\pi}{N})^{1-\alpha}]^{1/2} \cos(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k) \quad (3.8)$$

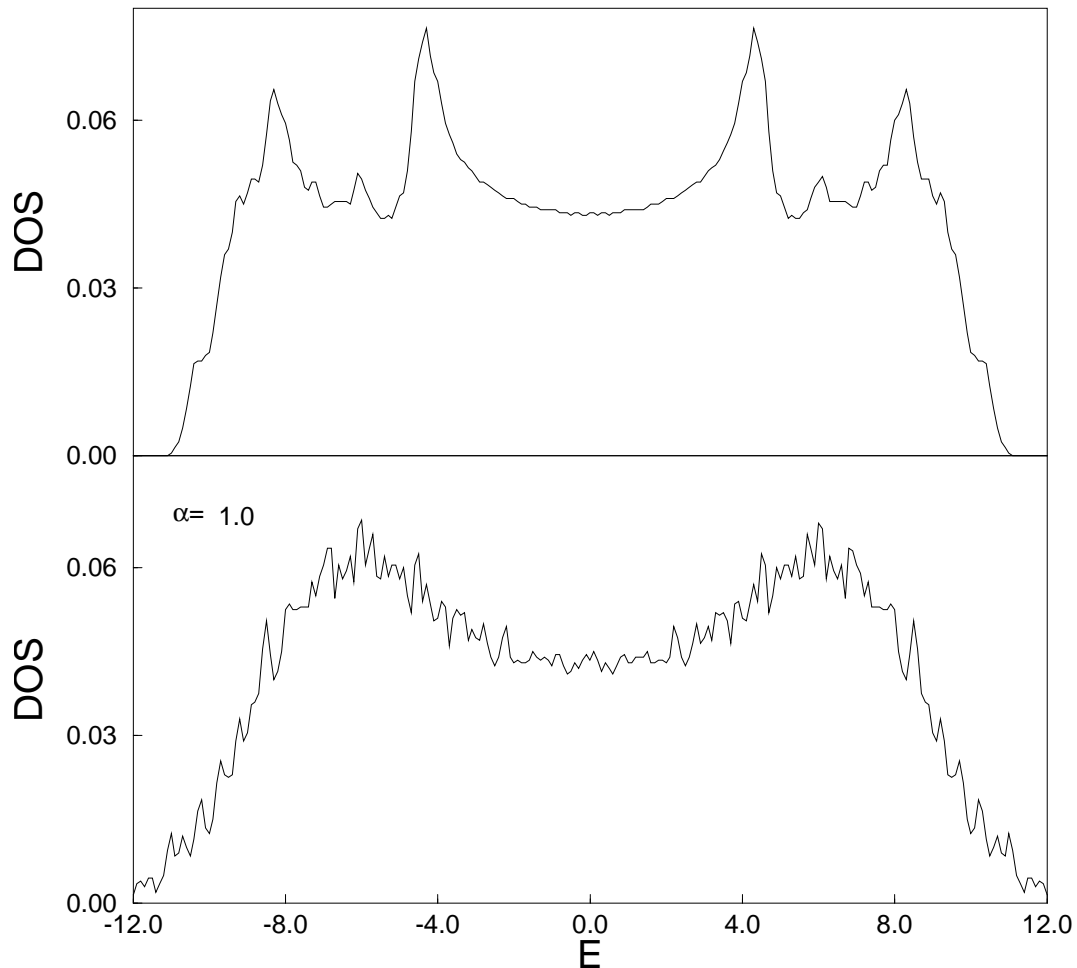


Figura 3.12: Densidade de estados(DOS) para cadeias com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping. Escolhemos $\epsilon = 0$ e $\alpha = 1.0$ e 2.5 . Observe que a banda de energias permitidas ao elétron é, neste caso, $-12 < E < 12$ (em unidades de t)

e ϕ_k são fases aleatórias uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 2\pi]$. A normalização de t_n foi escolhida no capítulo 2 como sendo $\langle t_n \rangle = 4$ e $\Delta t_n = \sqrt{\langle t_n^2 \rangle - \langle t_n \rangle^2} = 1$ de forma a forçar que $t_n > 0$ para qualquer n . Um gráfico de t_n versus n é mostrado na Fig. 3.11. Mais uma vez precisamos conhecer a banda de energias permitidas ao elétron através da densidade de estados. Para calcular a densidade de estados escolheremos a energia dos sítios $\epsilon = 0$ e mais uma vez usaremos o método de Dean. A Fig. 3.12 mostra o densidade de estados para cadeias de 10000 sítios com parâmetro de correlação $\alpha = 1.0$

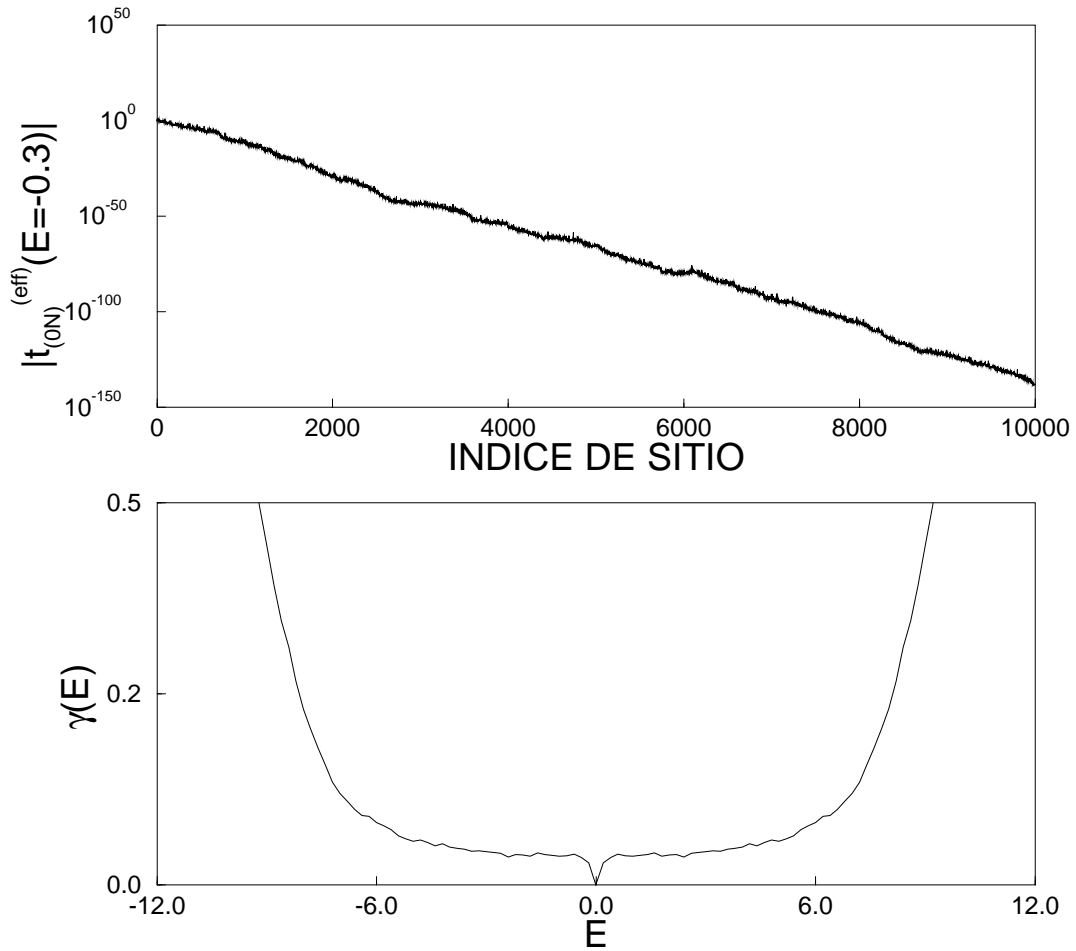


Figura 3.13: De baixo para cima temos o coeficiente de Lyapunov e o hopping efetivo em $E = -0.3$ para cadeias de 10000 sítios sem correlação de longo alcance nas amplitudes de hopping ($\alpha = 0.0$). Observe que o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero a menos de uma energia no centro da banda.

e 2.5. Note que a densidade de estados fica concentrada na região $-12 < E < 12$ decaindo exponencialmente fora deste intervalo. Observe que, também para este modelo, a densidade de estados torna-se menos ruidosa quando α cresce.

Utilizando as equações de renormalização para calcular o hopping efetivo, o coeficiente de Lyapunov pode ser obtido através de uma regressão linear de $\ln t_{0,N}^{(eff)}(E)$ versus N . A Fig. 3.13 mostra o coeficiente de Lyapunov para cadeias de 10000 sítios sem correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping e o hopping efetivo para uma energia,

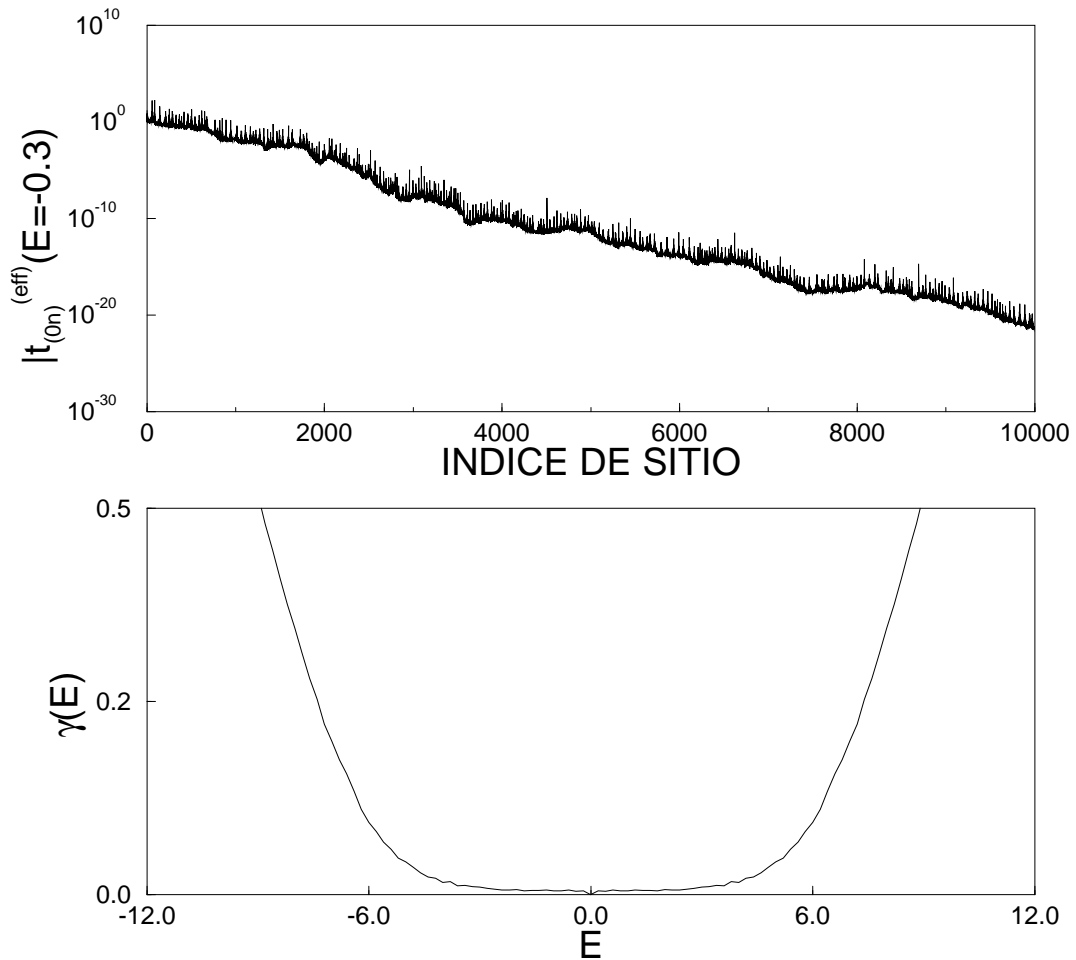


Figura 3.14: De baixo para cima temos o coeficiente de Lyapunov e o hopping efetivo em $E = -0.3$ para cadeias de 10000 sítios com correlação de longo alcance nas amplitudes de hopping ($\alpha = 1.0$). Observe que o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero a menos de uma energia no centro da banda.

em unidades de Δt , $E = -0.3$. Observe que o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero exceto no centro da banda. Esta energia é a bem conhecida energia de transmissão do centro da banda [29] que aparece em cadeias com integrais de transferência aleatórias. Fora do centro da banda o hopping efetivo revela um decaimento exponencial típico de funções de onda exponencialmente localizadas. Vamos investigar a influência de correlações de longo alcance nas integrais de transferência sobre a natureza dos estados

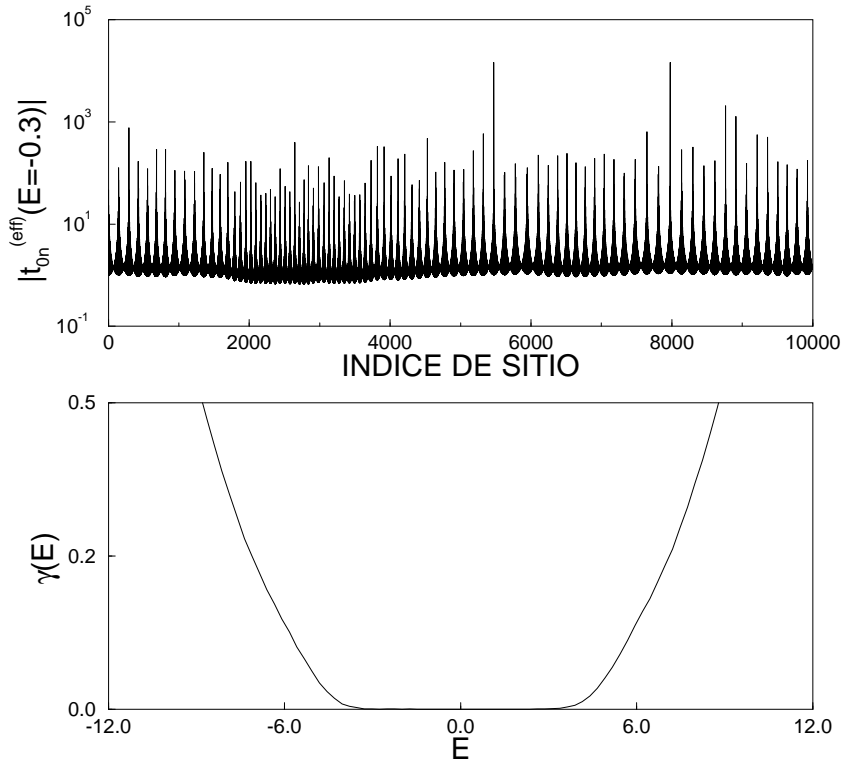


Figura 3.15: Coeficiente de Lyapunov para cadeias de 10000 sítios com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping com $\alpha = 1.5$. Observe que existe uma faixa de energias onde $\gamma(E)$ é zero.

eletrônicos. A Fig. 3.14 mostra o coeficiente de Lyapunov para cadeias de 10000 sítios com parâmetro de correlação $\alpha = 1.0$ e o hopping efetivo para uma energia, em unidades de Δt , $E = -0.3$. Observe que o coeficiente de Lyapunov é também diferente de zero exceto no centro da banda. Em contraste com a figura anterior, o coeficiente de Lyapunov tende a zero, no centro da banda, de forma mais suave e o hopping efetivo revela um decaimento exponencial, típico de funções de onda localizadas, porém mais lento.

Para maiores valores de α nossos resultados mostram a existência de uma fase de estados estendidos. A Fig. 3.15 mostra o coeficiente de Lyapunov para cadeias de 10000 sítios e parâmetro de correlação $\alpha = 1.5$ e o hopping efetivo para uma energia, em unidades de Δt , $E = -0.3$. Observe a existência de uma faixa de energias onde o coeficiente de Lyapunov é zero. Analisamos sistemas maiores e com outros valores de α e concluímos que para qualquer valor de $\alpha > 1$ o sistema apresenta uma faixa de energias

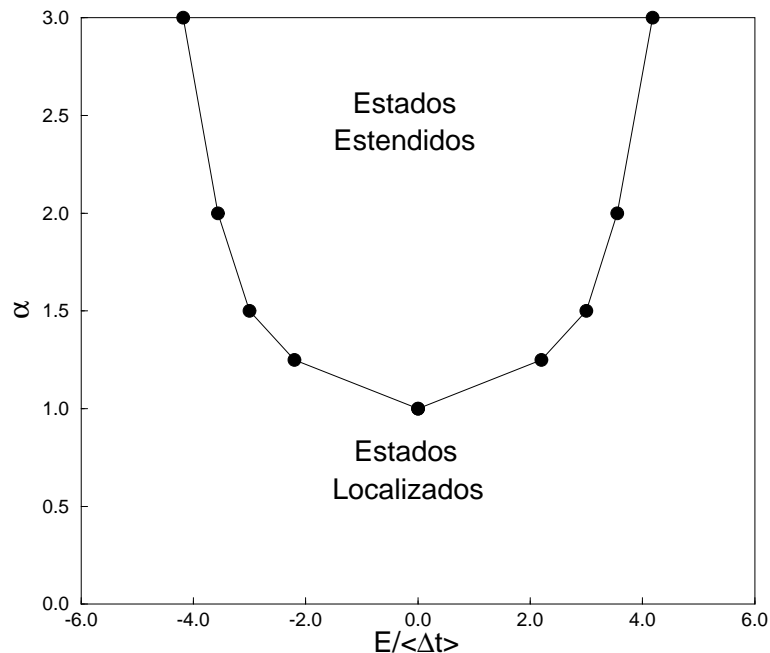


Figura 3.16: Diagrama de fase no plano $(E/\Delta t, \alpha)$ para cadeias de 10000 sítios com correlação de longo alcance nas amplitudes de hopping. A perfeita simetria do diagrama de fase é uma característica peculiar de modelos com hopping aleatório.

onde o coeficiente de Lyapunov se anula. Na Fig. 3.16 nós mostramos o diagrama de fase para este modelo. Este resultado é ainda mais surpreendente que os resultados para o modelo de Anderson com correlação de longo alcance na energia dos sítios. No modelo anterior a fase de estados estendidos é estabilizada para $\alpha > 2$ ou seja, para sequências com incrementos persistentes. Entretanto, no presente caso, a fase de estados estendidos é estabilizada mesmo com sequências antipersistentes.

Destes resultados e dos resultados apresentados na seção anterior concluímos que modelos de Anderson com correlações de longo alcance na distribuição de desordem apresentam uma transição metal-isolante. O modelo de Anderson com correlações de longo alcance na sequência de energias dos sítios apresenta uma transição metal-isolante quando o parâmetro α que controla as correlações é maior que dois ($\alpha > 2$) enquanto que o modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping apresenta transição metal-Isolante para $\alpha > 1$.

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

A natureza dos estados de um único elétron em sistemas desordenados foi estabelecida por Anderson no final da década de cinquenta. Para fortes graus de desordem os estados eletrônicos são exponencialmente localizados. Para desordem fraca, sistemas tri-dimensionais são condutores, ou seja, os estados são estendidos. Para um grau de desordem intermediário, o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante com energias críticas separando as duas fases. Anderson mostrou que os estados de um único elétron em sistemas unidimensionais desordenados são exponencialmente localizados para qualquer quantidade de desordem. Este resultado também é válido para sistemas bi-dimensionais exceto na presença de acoplamento spin-órbita. No final dos anos oitenta um série de modificações introduzidas no modelo de Anderson mostrou que sistemas unidimensionais podem apresentar comportamentos diferentes dos usuais. O ingrediente básico que foi introduzido no modelo de Anderson está relacionado com correlações de curto alcance na distribuição de desordem.

Neste trabalho analisamos duas variantes do modelo de Anderson uni-dimensional. Inicialmente analisamos um modelo *tight binding* unidimensional com correlações de longo alcance na distribuição de energia dos sítios. Para introduzir as correlações de longo alcance recorreremos às teorias sobre movimento Browniano fracionário. O traço de um movimento Browniano fracionário apresenta densidade espectral tipo $S(k) \propto 1/k^\alpha$ onde o parâmetro α está relacionado com o expoente de Hurst ($\alpha = 2H + 1$) e controla as

correlações. Como vários sistemas na natureza geram sequências com densidade espectral deste tipo escolhemos a distribuição de energias dos sítios com sendo o traço de um movimento Browniano fracionário de espectro $S(k) \propto 1/k^\alpha$. Usando um método de renormalização nós computamos o coeficiente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização). Nossos resultados numéricos indicam a existência de uma transição metal-isolante para $\alpha > 2$ ($H > 1/2$).

A segunda variante de modelo de Anderson estudada, consiste em um modelo *tight binding* com desordem nas integrais de transferências as quais apresentam correlações de longo alcance. Escolhemos as energias dos sítios iguais a zero e as integrais de transferência como sendo o traço de um movimento Browniano fracionário de espectro $S(k) \propto 1/k^\alpha$. Usando o mesmo método de renormalização computamos o coeficiente de Lyapunov e encontramos a existência de uma transição metal-isolante para $\alpha > 1$ ($H > 0$).

Em contraste com os modelos de correlação tipo dímeros, onde a delocalização ocorre em algumas energias ressonantes, nós concluímos que modelos com correlações de longo alcance na distribuição de desordem exibem uma verdadeira transição metal-isolante, com energias críticas separando as fases de estados estendidos e localizados. Resultados como estes só tinham sido observados em cadeias com potenciais incomensuráveis, uma classe distinta dos sistemas uni-dimensionais desordenados. A existência de uma transição para α grande, nos leva a crer que o parâmetro de correlação desempenha um papel semelhante a dimensão do sistema na teoria de escala. Os principais resultados desta dissertação estão publicados nas referências[54, 55]. É importante mencionar que quando estávamos concluindo este trabalho nós tivemos conhecimento de artigos recentes que confirmam a existência de transição Metal-isolante em sistemas com desordem correlacionada[56, 57, 58].

Um de nossos interesses futuros consiste em atacar estes modelos com ferramentas analíticas e obter precisamente os expoentes críticos deste sistema. Outras perspectivas seriam analisar os efeitos de acoplamentos spin-órbita em modelos uni-dimensionais e estudar a natureza dos estados eletrônicos de modelos *tight binding* bi-dimensionais com correlações de longo alcance na distribuição de desordem.

Referências Bibliográficas

- [1] L.J. de Jongh, in "Magnetic Phase Transition", Springer Series in Solid State Sciences, **V48**, 172 (1983).
- [2] R.B. Stinchcombe, "Critical Phenomena in Pure and Disordered Systems"
- [3] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [4] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [5] Atualmente, é conhecido que em duas dimensões um acoplamento spin-orbita pode estabilizar uma fase de estados estendidos para desordem fraca: S. Hikami, A.I. Larkin and Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980).
- [6] J. C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter. **1**, 8471 (1989).
- [7] D.H. Dunlap, H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [8] A. Bovier, J. Phys. A **25**, 1021 (1992).
- [9] H.-L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991).
- [10] S.N. Evangelou and D.E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992).
- [11] J.C. Flores and M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, L 1255 (1993).
- [12] M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 4773 (1994).
- [13] F. C. Lavarda, M. C. dos Santos, D. S. Galvão and B. Laks, Phys. Rev. Lett. **73**, 1267 (1994).

-
- [14] J. Heinrichs, Phys. Rev. B **51**, 5699 (1995).
- [15] C.-K Peng *et al*, Nature (London) **356**, 168 (1992); H.E. Stanley, Fractals **1**, 283 (1993).
- [16] P. Bak, C. Tang and K. Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987).
- [17] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Winston, Philadelphia 1976).
- [18] C. Kittel, *Introduction to Solid States Physics* (Wiley, New York 1976).
- [19] G. Burns, *Solid State Physics* (Academic Press, London 1985)
- [20] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. **A62**, 416 (1949).
- [21] N. F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor and Francis, London 1974).
- [22] N. F. Mott, Phil. Mag. **17**, 1259 (1968).
- [23] M. H. Cohen, H. Fritzsche, and S.R. Ovshinsky, Phys. Rev. Letters, **22**, 1065 (1969).
- [24] R. Zallen and H. Scher, Phys. Rev B **4**, 4471 (1971).
- [25] T. V. Ramakrishnan and P. A. Lee, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [26] D. J. Thouless, Physics Reports **13**, 93 (1974).
- [27] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York 1983)
- [28] K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **53**, 77 (1973).
- [29] G. Theodorou and M. Cohen, Phys. Rev. B. **13**, 4597 (1976).
- [30] L. Fleishman and D. C. Licciardello, J. Phys. C **10** L125 (1977).
- [31] C. M. Soukoulis and E. N. Economou, Phys. Rev. B **24** 5698 (1981).
- [32] M. Griniasty and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988).
- [33] S. Das Sarma, Song He and X.C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988).
- [34] D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988).

- [35] M. Hilke, J. Phys. A **27**, 4773 (1994).
- [36] J.C. Cressoni and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **53**, 5067 (1996); *ibid*, J. Phys.: Condens. Matter **8**, L83 (1996).
- [37] Veja por exemplo; M. Paczuski, S. Maslov and P. Bak, Phys. Rev. E **53**, 414 (1996) e as referências nele contidas.
- [38] M.C. Varriale, *Transição de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance*, Tese de doutorado, UFRGS , Porto Alegre (1994).
- [39] S. Russ, J. W. Kantelhardt, A. Bunde, S. Havlin and I. Webman, Physica A, (1999) no prelo.
- [40] B. B Mandelbrot and J. W. Van Ness SIAM Rev. **10** 422 (1968)
- [41] B. B Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, New York 1983).
- [42] J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York 1988); A. Tsonis, *Chaos: from theory to applications* (Plenum Press, New York 1992).
- [43] N.P. Greis and H.S. Greenside, Phys. Rev. A **44**, 2324 (1991).
- [44] T. Higuchi, Physica D **31**, 277 (1988).
- [45] C.G. Fox, Pure Appl. Geophys. **131**, 211 (1989).
- [46] A.R. Osborne and A. Provenzale, Physica D **35**, 357 (1989).
- [47] *The Science of Fractal Images*, editado por Heinz-Otto Peitgen e Dietmar Saupe (Springer-Verlag, New York 1988).
- [48] T. Higuchi, Physica D **46**, 254 (1988)
- [49] Carlos Augusto Rocha Sá de Melo, *Propriedades Eletrônicas de Trans-poliacetileno com distribuição de defeitos tipo sóliton*, dissertação de mestrado, PUC, Rio de Janeiro, 1986.
- [50] R. Farchioni *et al*, Phys. Rev. B **45**, 6383 (1992).
- [51] P. Dean, Rev. Mod. Phys. **44**, 127 (1972).

-
- [52] P.K. Datta and K. Kundu, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4465 (1994).
- [53] Veja por exemplo, S. Wiseman e E. Domany, Phys Rev. Lett. **81**, 22 (1998).
- [54] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett., **81**, 3735 (1998).
- [55] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Physica A, **4**, 466 (1999).
- [56] V.V. Flambaum. Preprint cond-mat 9901020.
- [57] D.N. Sheng and Z.Y. Weng. Preprint cond-mat 9901019.
- [58] F.M. Izrailev and A.A. Krokhin, Phys. Rev. Lett.,**82**, 4062 (1999).

Apêndice A

A.1 Programa em Fortran

```

                                PROGRAM Lyapunov
C      Calcula o inverso do comprimento de Lyapunov usando um
C      método de renormalização
C      Definir as variáveis
      character*15 filename
      integer q,n,i,nlat,IX,SEED,y,o
      parameter (q=60000,y=30000)
      real*8 ii,W(0:q),R,fnlat,G,pi,f(1:y),a,nn,U,E0,E1,E2,T,S,
& Sxx,Sx,Sy,Sxy,b,Wm2,Wm,m,logT
C      Vamos definir as variáveis principais
C      nlat = Número de sítios da cadeia
C      a = parâmetro de correlação  $\alpha$ 
C      SEED = Semente para o gerador de números aleatórios
C      W(q) = Matriz com nlat colunas para guardar as energia dos sítios
C      f(y) = Matriz com nlat/2 colunas para guardar as fases aleatórias
C      b = o negativo do coeficiente de Lyapunov
C      Nome do arquivo de saída de dados
      write(*,*)'filename'
      read(*,20) filename
20      format(a15)
      OPEN(UNIT=10,FILE=filename)
C      Dados de entrada
```

```

write(*,*)'nlat,a,SEED'
read(*,*) nlat,a,SEED
C      Inicializar algumas variáveis
      G=0.0
      Wm=0.0
      Wm2=0.0
C      Início da rotina para gerar as nlar/2 fases aleatórias
      pi=(2.0d0)*dasin(1.0d0)
      fnlat=dfloat(nlat)
      IX=nlat/2
      do 13 o=1,IX,1
13      f(o)=urand(SEED)*(2.0*pi)
      continue
C      Fim da rotina para gerar as nlar/2 fases aleatórias
C      Iniciar rotina para gerar a sequência com correlações de longo alcance
      do 24 i=1,nlat,1
      W(i)=0.0
      ii=dfloat(i)
      do 21 n=1,IX,1
      nn=dfloat(n)
      G=dcos((2.0*pi*ii*nn/fnlat)+f(n))
      W(i)=W(i)+((R*(nn**(-a))*((2.0*pi/fnlat)**(1-a))))**(0.5))*G
21      continue
C      Iniciar sequência de normalização
      Wm=Wm+W(i)
      Wm2=Wm2+(W(i))**(2.0)
      G=0.0
24      continue
      fnlat=dfloat(nlat)
      Wm=Wm/fnlat
      Wm2=Wm2/fnlat
      m=(Wm2-Wm**2)**(0.5)
      do 27 i=1,nlat,1
      W(i)=((W(i)-Wm)/m)

```

```
27      continue
C      Fim da rotina para gerar a sequência com correlações de longo alcance
C      Início da rotina para dizimar a cadeias e calcular o coeficiente de Lyapunov
do 15 U=-4,4,.01
  b=0.0
  S=0.0
  Sx=0.0
  Sy=0.0
  Sxx=0.0
  Sxy=0.0
  W(0)=1
  i=0
  logT=0.0
  E0=W(0)
  E1=W(1)
  E2=W(2)
do 14 i=0,nlat-1,1
  If (i.gt.0) then
  E2=W(i+1)+(Xhopp)*(1/(U-E1))*(Xhopp)
  logT=logT+dlog(abs(1/(U-E1)))
  E1=E2
  endif
C      Início da regressão linear para obter o coeficiente de Lyapunov
  ii=dfloat(i)
  S=S+1/R
  Sxy=Sxy+ii*logT/R
  Sx=Sx+ii/R
  Sy=Sy+logT/R
  Sxx=Sxx+(ii**2)/R
14      continue
  b=(S*Sxy-Sx*Sy)/(S*Sxx-(Sx)**2)
  Write(10,*)U,-b
15      continue
C      Fim da rotina para calcular o coeficiente de Lyapunov
```

```
        stop
        end
C      Gerador de números aleatórios
      REAL FUNCTION URAND( XN )
      INTEGER XN
      INTEGER A, C
      DATA A/2147437301/
      DATA C/453816693/
      XN = A * XN + C
      IF( XN .LT. 0 ) XN = XN + 2**31
      URAND = XN / 2.0**31
      END
```