

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**Propriedades de Transporte no Modelo de  
Anderson 1D com Desordem Correlacionada**

BEETHOVEN DOS SANTOS

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS  
INSTITUTO DE FÍSICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

# Propriedades de Transporte no Modelo de Anderson 1D com Desordem Correlacionada

BEETHOVEN DOS SANTOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado no  
Instituto de Física da Universidade Federal  
de Alagoas como parte dos requisitos para  
obtenção do título de Bacharel em Física

Orientador: Francisco Anacleto B. Fidelis de Moura

Maceió - Alagoas - Brasil

31 de janeiro de 2007

*À Josineide e Leonardo.*

---

## AGRADECIMENTOS

Este espaço é destinado àquelas pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a realização de todo o meu trabalho de Iniciação Científica e sua conclusão neste texto. Acredito que isto não seria possível sem a constante e imprescindível ajuda de umas, e da agradável convivência com outras. Em primeiro lugar, agradeço ao Prof. Dr. *Francisco A. B. Fidelis de Moura*, pela indispensável orientação durante estes anos de IC, não só pela teoria necessária, mas também pela enorme ajuda computacional, além dos grandes conselhos que provavelmente me ajudarão na continuação de minha carreira profissional. Mas em se falando de conselhos, todos os professores que conheci durante meu bacharelado também merecem os meus agradecimentos: em especial o Prof. Dr. *Marcelo L. Lyra* pelos conselhos e co-orientação durante minha Iniciação Científica; o Prof. Dr. *Heber R. da Cruz* pelo meu desenvolvimento computacional e matemático quando seu aluno de Métodos de Física Computacional e Métodos Matemáticos da Física; a Prof. Dra. *Solange B. Cavalcanti* e o Prof. Dr. *Evandro J. T. de A. Gouveia* pelas excelentes aulas de Física II e Mecânica Geral (ela) e Eletromagnetismo (ele), recheadas de grande teoria e ótimos conselhos; o Prof. Dr. *Jenner B. B. Filho* por sua visão aguçada em relação aos pilares da educação e pelas ótimas aulas de Fundamentos da Física; a Prof. Dra. *Maria T. de Araújo* e os Prof. Drs. *Kleber C. Serra*, *Marcos V. D. Vermelho*, *José C. Cressoni*, e *Jandir M. Hickmann*, por suas aulas durante toda minha graduação; os Prof. Drs. *M. V. Gandhi Mohan*, *Crisógono R. da Silva*, *Iram M. Gléria* e os demais professores do IF que tiveram influência nesse meu período de formação acadêmica. Também agradeço aos professores do Departamento de Matemática - UFAL, *Ádam C. Fernandez*, *Ivam A. C. de Albuquerque* e *Adroaldo de V. Dorville* por suas aulas e por permitirem a transferência de uma pequena parte de seus conhecimentos para mim enquanto aluno. Um enorme agradecimento aos precursores dessa minha jornada acadêmica, Prof. Dr. *Carlos Argolo*, Prof. *Ednaldo Tenório* e Prof. *André Luiz*

(tenho muitas saudades daqueles tempos de CEFET-AL). Também agradeço aos meus grandes amigos(as) *Manoel Pereira, Askery Alexandre, Jorge Luiz, Thaís Freitas, Caio Faustino, Cícero Rita, e Samuel Albuquerque* por influenciarem os rumos e decisões que tomei durante este tempo de convivência, e também a *André Moura, Augusto Andrade, Edmilson Ghisalberti, Elder Claudino, Jobson Torres, Leonardo Bruno, Lucas Maia, Rafael Pereira, Romane Bezerra, Rosa Carolina, Taísa Bibiano, Thiago Bento, Jadielson Ângelo, Clarice Monteiro, Agnaldo José, Amadeu Bandeira, Arlan Ferreira, Cesar Moura, Dainy Pacheco, Elton Malta, Geraldo Sobral, Hécio Bezerra, Ildemir Ferreira, Ítalo de Oliveira, Itamar Vidal, Marcelo Felisberto, Nadja Vieira, Vinícius Manzoni, Wagner Ferreira, Wandearley Dias, Willamys Cristiano, Cícero Julião, Everaldo Chavez, Fabiano Barbosa, Frederico Passos, Gentil II, Lidiane Maria, Patrícia Araújo, Rodrigo Trindade, Maria Augusta, Laís Marcos, e Arlete*, por estes anos de agradável convivência. Em especial, devo agradecimentos as pessoas mais essenciais à realização deste, e de qualquer outro trabalho que porventura venha a fazer, *Josineide e Leonardo* (meus pais), e *Handerson e Kátia* (meus irmãos). Por fim, agradeço ao apoio financeiro da *FAPEAL* e do *CNPq*, e com mais importância, agradeço a *DEUS*.

## RESUMO

Os estados de um único elétron em cadeias unidimensionais desordenadas são exponencialmente localizados. A teoria de escala de Anderson mostra que uma transição metal-isolante, comumente chamada de transição de Anderson, não pode ser observada em sistemas com dimensionalidade  $d < 2$ . Nos últimos anos, diversos trabalhos sobre o modelo de Anderson unidimensional têm mostrado que correlações internas sobre a distribuição da desordem podem induzir estados eletrônicos delocalizados. Neste trabalho, nós estudamos a natureza dos estados eletrônicos no modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo-alcance na distribuição da desordem, onde 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. Este modelo com correlações na desordem exibe uma transição metal-isolante para  $\alpha > 2$ . O alargamento do pacote de onda pela rede unidimensional pode ser feito sob 3 regimes distintos, a depender do valor do parâmetro de correlação  $\alpha$ . Para  $\alpha < 1$  temos um regime difusivo, para  $1 < \alpha < 2$  temos um regime superdifusivo, e para  $\alpha > 2$  o pacote de onda sofre um alargamento balístico até alcançar os limites da cadeia. Um segundo modelo neste trabalho mostra que a inclusão de interações elétron-fônon acopladas aos termos não-diagonais do Hamiltoniano de Anderson 1D correlacionado, induz o surgimento de estados localizados mesmo para  $\alpha > 2$ .

# Sumário

Folha de rosto . . . . .	i
Dedicatória . . . . .	ii
Agradecimentos . . . . .	iii
Resumo . . . . .	v
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Sistemas sem desordem . . . . .	2
1.2 Sistemas desordenados . . . . .	7
1.2.1 Localização em sistemas desordenados . . . . .	9
<b>2 O modelo de Anderson</b>	<b>12</b>
2.1 Introdução ao modelo de Anderson . . . . .	12
2.2 O modelo de Anderson 1D com correlações na desordem . . . . .	17
2.2.1 Movimento Browniano fracionário . . . . .	18
<b>3 Dinâmica eletrônica no modelo de Anderson 1D</b>	<b>21</b>
3.1 Introdução . . . . .	21
3.2 Resultados e discussão . . . . .	23
3.3 Variações do modelo de Anderson: interação elétron-fônon . . . . .	28
3.3.1 Propriedades da MNLSE em uma rede periódica . . . . .	32
3.3.2 Propriedades da MNLSE em uma rede desordenada . . . . .	34

---

<b>4 Conclusões e perspectivas</b>	<b>36</b>
Referências . . . . .	38

# Capítulo 1

## Introdução

Há mais de meio século, os estudos de sólidos desordenados vêm despertando grande interesse entre físicos de matéria condensada de todo o mundo. A enorme busca por resultados nesse campo se deve a uma importante característica da natureza: a grande maioria dos sólidos que nela se encontram, sejam eles naturais ou criados em laboratórios, não são perfeitamente cristalinos. Isso tem motivado a formulação de teorias e a construção de alguns modelos que têm esse aspecto da natureza como base. Dentre esses modelos estão o modelo de Anderson para redes atômicas e o modelo de Heisenberg ferromagnético. Ambos os modelos têm como uma importante característica, a localização de quantidades físicas (elétrons no caso do primeiro e ondas de spin no caso do segundo), induzida pela presença de desordem no material. Apenas o modelo de Anderson será abordado neste texto. Originalmente, tal modelo considera os elétrons movendo-se apenas sob a influência de um potencial aleatório devido à desordem no meio. No entanto, estudos recentes motivam à inclusão de correlações na desordem e sugerem efeitos interessantes quando a interação dos elétrons com os fônons da rede é incluída na modelagem analítica e computacional. O modelo de Anderson será abordado em mais detalhes no capítulo 2. Antes, faremos neste

capítulo uma descrição dos conceitos básicos sobre sistemas cristalinos e sistemas desordenados, que são a base de entendimento da teoria abordada no texto. Para finalizar este trabalho, apresentaremos no capítulo 3, alguns quantidades relevantes a uma análise da dinâmica eletrônica no modelo de Anderson 1D utilizando a teoria e os conceitos acumulados durante o texto. Também apresentaremos alguns de nossos resultados para essa dinâmica e tentaremos, na medida do possível, fazer uma comparação com os resultados adquiridos na literatura.

## 1.1 Sistemas sem desordem

Até o fim da Idade Média, a palavra cristal era designada apenas ao gelo e, um pouco depois, ao quartzo. Após esse período, ela adquiriu um significado mais geral. A maior parte dos estudos em física do estado sólido se dedicam ao estudo dos cristais e dos elétrons em cristais [1, 2]. O interesse dos físicos por esta área aumentou consideravelmente após a descoberta da difração de raios-X por W. e L. Bragg em 1913, e uma série de publicações subsequentes sobre simples cálculos e previsões das propriedades cristalinas.

Um cristal ideal é construído por uma repetição espacial, em escala atômica, de unidades estruturais idênticas. Alguns cristais contêm em suas unidades estruturais um único átomo, como o ouro, a prata e o cobre. No entanto, normalmente as unidades estruturais contêm diversos átomos ou moléculas. Além disso, um cristal pode ser composto por mais de um elemento químico, como em NaCl, e pode também conter grupos associados de átomos idênticos, como em H<sub>2</sub>. A estrutura de todos os cristais são descritas em termos de uma única *rede periódica*, com um grupo de átomos fixados em cada ponto da rede. Um cristal é formado pela repetição deste grupo (*base*) no espaço. A relação lógica para a formação de uma estrutura cristalina pode ser escrita como

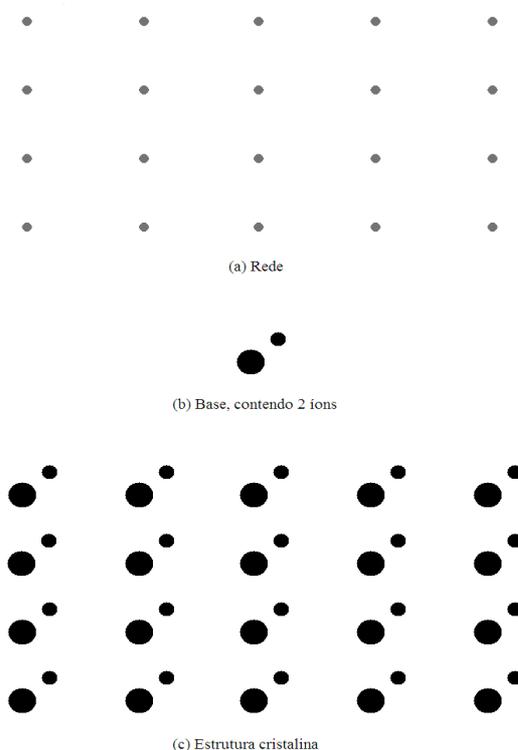


Figura 1.1: Construção de um cristal de acordo com a relação (1.1). Em (a) temos uma rede periódica que, adicionada a uma base em (b) forma a estrutura cristalina (c).

$$\text{rede periódica} + \text{base} = \text{estrutura cristalina.} \quad (1.1)$$

Toda base de átomos de uma rede é idêntica em composição, arranjo e orientação. A formação de uma estrutura cristalina pela adição de uma base a todo ponto da rede periódica é mostrada na Fig. 1.1.

Nosso interesse nesta sessão é apresentar alguns conceitos sobre as propriedades de transporte eletrônico em sistemas sem desordem (estruturas cristalinas). Para isto, precisamos de um modelo que descreva os estados de um elétron na presença de um potencial periódico. Tal modelo é chamado de **modelo de Bloch**.

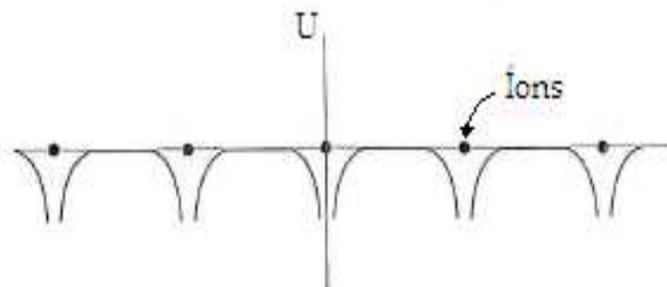


Figura 1.2: Típico potencial periódico em uma rede unidimensional. Os pontos em preto representam os íons da rede cristalina.

### O modelo de Bloch

Sabemos que os íons em um cristal perfeito estão arranjados em uma rede periódica regular. Então vamos considerar aqui o caso de um elétron sujeito a um potencial periódico  $U(\mathbf{r})$ , sendo que

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

onde  $\mathbf{R}$  é um vetor da rede de Bravais<sup>1</sup> subjacente ao cristal. Um típico potencial cristalino é mostrado na Fig. 1.2.

Para obtermos informações importantes sobre as propriedades de transporte eletrônico em sistemas periódicos, temos que levar em conta que a ordem dos espaçamentos atômicos na rede, ou seja, a ordem de grandeza de  $\mathbf{R}$ , é de  $10^{-8}$  cm, que por sua vez é da ordem de um típico comprimento de onda de De Broglie. Por este motivo, qualquer análise da dinâmica eletrônica em redes cristalinas deve utilizar os conceitos e considerações da mecânica quântica. Com isso, as propriedades de transporte em sistemas periódicos passam a ter conexão direta com a natureza dos estados eletrônicos nesses sistemas. Portanto, o que vamos fazer aqui é examinar a equação

<sup>1</sup>A rede periódica com a qual formamos a estrutura cristalina.

de Schrödinger para um elétron

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi = \varepsilon\psi, \quad (1.3)$$

onde  $U(\mathbf{r})$  tem a periodicidade (1.2). Podemos ver que a equação de Schrödinger para elétrons livres é um caso especial de (1.3), onde  $U(\mathbf{r}) = 0$ . Os elétrons independentes<sup>2</sup> que obedecem a equação de Schrödinger com um potencial periódico são chamados *elétrons de Bloch*. Uma importante propriedade sobre os estados estacionários dos elétrons de Bloch é que os autoestados  $\psi$  do Hamiltoniano podem ser escolhidos na forma de uma onda plana vezes uma função com a periodicidade da rede de Bravais subjacente, ou seja,

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

onde

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

para qualquer  $\mathbf{R}$  na rede de Bravais.

Esta propriedade é conhecida como *teorema de Bloch* [1]. As funções  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  são conhecidas como funções de Bloch. Para cada vetor de onda  $\mathbf{k}$ , existem várias soluções para a equação de Schrödinger, o que está caracterizado pelo índice  $n$ , conhecido como *índice de banda*. Cada índice de banda  $n$  corresponde a um nível eletrônico especificado  $E_n(k)$ , chamado de *banda de energia*.

Podemos escrever o teorema de Bloch na seguinte forma alternativa: os autoestados  $\psi$  de  $H$  podem ser escolhidos de forma a existir um vetor de onda  $k$  associado a cada  $\psi$  tal que

---

<sup>2</sup>Elétrons que não interagem com o *gás de elétrons* do cristal.

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot(R)}\psi(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

Uma importante diferença entre o modelo de Bloch e o modelo do elétron livre está na relação entre o momento do elétron e o vetor de onda associado a cada autoestado do Hamiltoniano periódico  $H$ . No caso dos elétrons livres, o vetor de onda é simplesmente  $p/\hbar$ , enquanto que no modelo de Bloch, o vetor de onda  $k$  não é mais proporcional ao momento do elétron. Isto acontece por que o Hamiltoniano não apresenta invariância translacional na presença de um potencial não-periódico e, portanto, seus autoestados não são autoestados simultâneos do operador momento.

Nos cristais, as funções de onda (funções de Bloch) são estendidas por todo o material, devido a periodicidade do potencial. Por isso, em qualquer posição do cristal, a probabilidade dela ser ocupada pelo elétron é sempre diferente de zero. Portanto, o elétron pode mover-se livremente pelo sólido. No capítulo 3, mostraremos alguns resultados sobre a dinâmica eletrônica em um cristal (modelo de Bloch) uni-dimensional, onde faremos comparações com o caso desordenado.

A grande maioria dos sólidos encontrados na Terra são descritos em termos de estruturas cristalinas ideais. No entanto, tais idealizações de estruturas perfeitas podem nos conduzir a distorções nas previsões de certas propriedades e fenômenos físicos dos sólidos. Sabemos, por exemplo, que todo sólido é finito em extensão (sendo assim, os cristais são limitados por *superfícies* ou *contornos internos*). Também temos que levar em conta que defeitos de rede, como a presença de átomos impuros, deslocamentos, e distúrbios locais da periodicidade da rede nunca estarão ausentes em qualquer cristal real. Todas estas características dos sólidos reais têm motivado nas últimas décadas, um grande número de estudos sobre sistemas desordenados por parte dos físicos de matéria condensada.

## 1.2 Sistemas desordenados

Em sólidos cristalinos, a perfeita simetria translacional permite a construção de modelos cujas soluções são funções de onda eletrônicas estendidas por todo o material. Algumas propriedades destes sistemas alcançam valores assintóticos no limite termodinâmico. A resistência elétrica, por exemplo, é nula de acordo com o modelo de Bloch para cristais, e a condutância elétrica, devido à relação inversa com a resistência, torna-se infinita. Mas os cristais perfeitos representam uma clara minoria dos sólidos reais. Na verdade, para uma descrição mais precisa de um sólido, é fundamental a inclusão de um certo grau de desordem, o que pode modificar bastante algumas propriedades observadas do material.

Para termos uma percepção um pouco mais clara do significado do termo "desordem", devemos a princípio, lembrar o que é uma estrutura cristalina. Tal estrutura pode ser imaginada como sendo formada por uma rede tri-dimensional de elementos (átomos ou moléculas) idênticos e espaçados regularmente.

A inclusão da desordem neste sistema está caracterizada pelas imperfeições da rede, tais como, impurezas, isótopos estranhos, lacunas e(ou) deslocamentos. Estes defeitos são mostrados esquematicamente na Fig. 1.3.

Uma clara consequência da presença de desordem em determinado sistema é a bem conhecida lei de Ohm em um fio metálico:

$$U = RI = I/G, \quad (1.7)$$

onde  $U$  é a diferença de potencial entre as extremidades do fio,  $I$  a corrente elétrica,  $R$  a resistência elétrica e  $G$  a condutância elétrica do fio. Mesmo bons condutores de eletricidade, como o ouro (Au) e o cobre (Cu), têm resistência finita em  $T = 0$ . Sendo assim, eles não podem ser descritos nos moldes de uma estrutura cristalina [1, 3]. Além disso, em baixas temperaturas, são observadas diferenças mais significantes

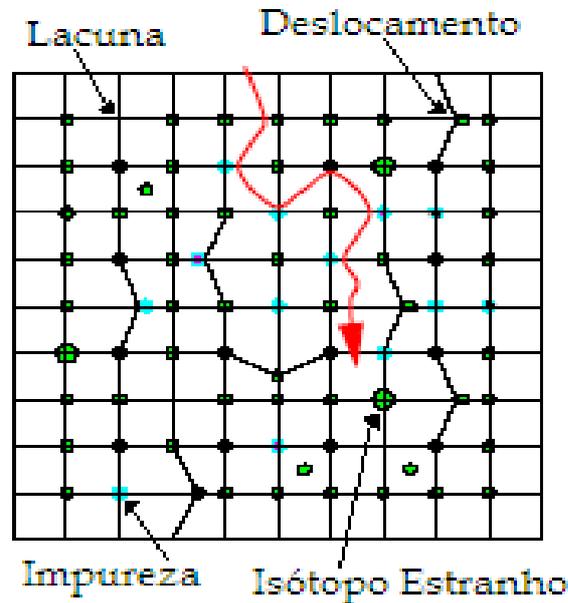


Figura 1.3: Esquema em 2D de um sólido com deformações em sua estrutura. Os pontos de cores diferentes indicam átomos diferentes, enquanto que os pontos de diferentes tamanhos indicam isótopos diferentes dos átomos que constituem o sólido a princípio. A linha vermelha indica, de uma forma rudimentar, o caminho do elétron através do sólido.

entre o comportamento cristalino e o de um sólido desordenado.

O caso em que  $T \rightarrow 0$  é particularmente importante. P. W. Anderson [3, 4, 5, 6, 7] mostrou que, para um sistema que apresenta forte desordem, há a ocorrência de uma transição de uma fase metálica, em que  $R > 0$ , para uma fase isolante ( $R \rightarrow \infty$ ). Chamamos isto de *transição metal-isolante induzida por desordem* [3, 8, 9]. O modelo de Anderson prevê que tal transição não ocorre em sistemas de dimensão menor ou igual a 2, onde os estados estacionários dos elétrons do sistema são exponencialmente localizados. O termo "exponencialmente" pode ser facilmente entendido com uma rápida observação na Fig. 1.4<sup>3</sup>. O decaimento exponencial da

<sup>3</sup>Figura extraída da referência [10].

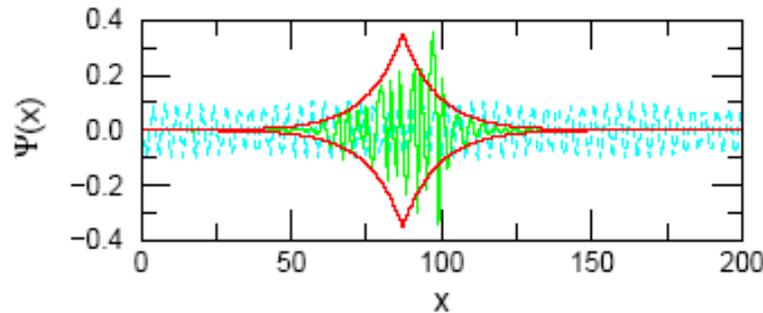


Figura 1.4: Esquema de um estado estendido (linha pontilhada azul) e um estado localizado (linha sólida verde) em um sistema desordenado unidimensional. O sistema é composto de 200 sítios. Note o decaimento exponencial a partir do centro de localização (linha sólida vermelha). O comprimento de localização de acordo com a Eq. (1.8) é  $\lambda \approx 12$ .

função de onda mostrada na figura pode ser escrito como

$$\psi(x) \approx \exp\left(-\frac{|x - x_0|}{\lambda}\right), \quad (1.8)$$

onde  $\lambda$  é chamado de *comprimento de localização* e é uma medida da extensão espacial da função de onda localizada.

### 1.2.1 Localização em sistemas desordenados

Em materiais desordenados, o conceito de localização de funções de onda eletrônicas está intimamente ligado com o grau de desordem do sistema. A desordem nestes sistemas é considerada em termos da largura da distribuição  $W$  dos potenciais da rede em comparação com a largura da banda de energias  $B$  permitidas para os elétrons no material. Se o grau de desordem é forte, as interferências destrutivas na função de onda provenientes das barreiras de potencial (átomos nos sítios da rede) induzem estados eletrônicos localizados da função de onda que seguem o padrão da Eq. (1.8).

A inclusão de desordem em sistemas inicialmente cristalinos não têm apenas caráter teórico, mas experimental também. Quando realizamos algum tipo de experimento, os fenômenos de interesse a serem observados, são caracterizados pelas ferramentas experimentais empregadas na realização do experimento. Desta forma, podemos causar distúrbios na rede cristalina fazendo, por exemplo, dopagem com átomos "impuros", ou produzindo deslocamentos estruturais na rede. Com isso, podemos obter informações úteis sobre certas propriedades do sólido que dependem das mudanças estruturais realizadas.

Existem vários experimentos na literatura onde transições metal-isolante em sistemas com desordem vêm sendo observadas. Os mais proeminentes são os realizados com silício dopados com fósforo ou bário [3, 8, 11, 12, 13]. Nestes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. Uma variação na concentração dos elementos dopantes e, conseqüentemente, na distância entre os dopantes, modifica a força ou largura da desordem.

As propriedades de transporte em sistemas desordenados foram estudadas em peso nas últimas décadas do século XX. Um dos modelos mais relevantes para estes tipos de sistemas é o modelo de Anderson [5, 14], e sua relevância vem do fato de que o tipo de transição de maior importância nestes materiais é a transição metal-isolante induzida por desordem, comumente chamada de *transição de Anderson*. No próximo capítulo, faremos uma descrição dos elementos básicos deste modelo, bem como suas previsões sobre a dinâmica eletrônica dos materiais desordenados.

Nas últimas décadas, variações do modelo de Anderson também foram objetos de estudo pela comunidade científica [15, 16, 17, 18, 19, 20]. Alguns destes modelos sugerem resultados interessantes quando modificações na distribuição da desordem do material são realizadas. Um exemplo é o modelo de Anderson com desordem correlacionada, que nos últimos anos despertou o interesse dos físicos pelo fato de que seus resultados indicam soluções estendidas para a função de onda em sistemas

---

desordenados. Veremos no próximo capítulo, e no seguinte, as implicações que a presença de correlações na desordem podem causar no modelo de Anderson unidimensional.

# Capítulo 2

## O modelo de Anderson

### 2.1 Introdução ao modelo de Anderson

Até meados da década de cinquenta os estudos em física do estado sólido se concentravam em sólidos cristalinos. Em 1958, P. W. Anderson introduziu um modelo de sistema desordenado [5] em que a dinâmica quântico-mecânica de certas entidades do sistema (spins ou elétrons, por exemplo) era descrito, não em termos da temperatura, mas sim através de saltos quânticos entre os sítios da rede.

Faremos aqui uma breve descrição do modelo de Anderson uni-dimensional em que os elétrons são as entidades móveis do sistema. Para tal, vamos assumir que nosso sistema é composto de sítios  $i$  distribuídos regularmente, ou aleatoriamente, em uma cadeia uni-dimensional. Vamos assumir também que certas entidades, os elétrons, ocupam estes sítios. Um elétron que ocupa o sítio  $i$ , terá energia  $\epsilon_i$ . A desordem neste sistema está caracterizada no fato de que as energias  $\epsilon_i$ 's estão distribuídas aleatoriamente pelos sítios da cadeia dentro do intervalo  $[-W/2, W/2]$ , onde  $W$  caracteriza a *largura da desordem*. Nesse modelo, o movimento dos elétrons se dá através de saltos quânticos entre os sítios  $i$  e  $j$ , sendo então necessário um

elemento de interação  $T_{ij}(r_{ij})$  entre eles. Este elemento, a *integral de transferência*<sup>1</sup>, decai rapidamente com a distância entre os sítios  $i$  e  $j$ , e é responsável pelo transporte do elétron entre eles. O Hamiltoniano de Anderson pode então ser escrito como

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{j \neq i} T_{ij} |i\rangle\langle j|. \quad (2.1)$$

Este Hamiltoniano também pode ser representado na forma matricial abaixo

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & T_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ T_{21} & \epsilon_2 & T_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & T_{32} & \epsilon_3 & T_{34} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & T_{N-2,N-3} & \epsilon_{N-2} & T_{N-2,N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & T_{N-1,N-2} & \epsilon_{N-1} & T_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T_{N,N-1} & \epsilon_N \end{bmatrix}.$$

O estado  $|i\rangle$  representa o orbital atômico centrado no sítio  $i$ , ou seja,  $|i\rangle$  é a função de onda de um elétron localizado no sítio  $i$ . O conjunto formado por todos estes estados representam uma base na qual podemos expandir os autoestados  $\psi$  de  $H$ , na forma  $\psi = \sum c_i |i\rangle$ , onde  $c_i$  é a amplitude da função de onda no sítio  $i$ . Para obtermos estes autoestados, temos que resolver a equação de Schrödinger ( $H\psi = E\psi$ ) para este Hamiltoniano. De acordo com o Hamiltoniano de (2.1) temos

$$H|i\rangle = \epsilon_i |i\rangle + \sum_{j \neq i} T_{ji} |j\rangle. \quad (2.2)$$

Portanto, utilizando a expansão de  $\psi$  na base dos orbitais atômicos temos

---

<sup>1</sup>Também chamada de amplitude de *hopping*.

$$H\psi = \sum_i c_i H|i\rangle = \sum_i c_i \left( \epsilon_i |i\rangle + \sum_{j \neq i} T_{ji} |j\rangle \right), \quad (2.3)$$

onde, expandindo o somatório e realizando um arranjo de termos e índices, iremos chegar a

$$H\psi = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{j \neq i} T_{ij} c_j \right) |i\rangle. \quad (2.4)$$

Logo, a equação de Schrödinger torna-se

$$\begin{aligned} E\psi &= H\psi \\ E\psi &= \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{j \neq i} T_{ij} c_j \right) |i\rangle \\ \sum_i E c_i |i\rangle &= \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{j \neq i} T_{ji} c_j \right) |i\rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Portanto, cada termo da Eq. (2.5) obedece a equação

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_{j \neq i} T_{ij} c_j. \quad (2.6)$$

Nosso interesse é analisar o caso unidimensional em que o hopping tem a mesma magnitude entre todos os sítios e se dá apenas entre os  $z = 2$  primeiros sítios vizinhos. Então a Eq. (2.6) torna-se

$$E c_i = \epsilon_i c_i + T \sum_{j=i-1}^{j=i+1} c_j = \epsilon_i c_i + T(c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (2.7)$$

Podemos perceber que no caso cristalino ( $W = 0$ )<sup>2</sup>, esta equação se reduz à

---

<sup>2</sup>Ou seja, as energias são todas iguais.

$$Ec_i = T(c_{i-1} + c_{i+1}), \quad (2.8)$$

onde fixamos  $\epsilon_i = 0$  sem perda de generalidade.

Se as amplitudes  $c_i$  forem escolhidas na forma  $c_n = c_0 e^{ink}$ , a equação acima é satisfeita se  $E = 2T \cos k$ , ou seja, as energias  $E$  estão dentro do intervalo  $-2T < E < 2T$ . Com isso, vemos que a largura da banda cristalina é  $B = 4T$ . Na verdade, quando  $T$  é constante e se dá apenas entre os primeiros vizinhos, a largura da banda cristalina para uma rede de dimensão  $d$  e número de coordenação<sup>3</sup>  $z$  é  $B = 2zT$ .

Para analisar o comportamento da função de onda em função do tempo, Anderson (em seu artigo de 1958 [5] considerou um elétron inicialmente localizado em um determinado sítio  $m$  da cadeia, em  $t = 0$ . Neste artigo ele argumentou não há transporte eletrônico pela cadeia quando  $T^4$  é menor que um certo valor crítico  $T_c$  da ordem de  $W$ . O mesmo ocorre quando  $T$  cai "mais rápido" que  $1/r^2$  para grandes distâncias de um determinado sítio. Neste caso, mesmo em  $t \rightarrow \infty$ , a amplitude da função de onda nas vizinhanças do sítio  $m$  cai rapidamente com a distância, enquanto que a amplitude no sítio  $m$  permanece finita.

A característica mais importante do modelo de Anderson para um sólido desordenado está na razão  $W/B$  entre a largura de distribuição dos potenciais e a banda de energias permitidas para um elétron no sólido<sup>5</sup>. Anderson mostrou em 1958 [5] que se a razão  $W/B$  for suficientemente grande, todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados. Qualitativamente, isto pode ser escrito como

$$(W > B) \longrightarrow (\text{localização}). \quad (2.9)$$

Se ao invés da relação acima tivermos  $W/B \approx 1$  (desordem intermediária), estados

<sup>3</sup>O número de primeiros vizinhos.

<sup>4</sup>Ou a média de  $T$  no caso geral onde as amplitudes de hopping são distintas.

<sup>5</sup>Esta largura de bandas torna-se a largura de banda cristalina quando todos os potenciais no sólido são iguais.

estendidos e localizados podem coexistir no sólido.

Uma das maneiras de entendermos como os estados de um elétron são susceptíveis a localização na presença de um potencial desordenado é analisarmos o "movimento" dos elétrons entre os sítios da rede levando-se em conta a diferença de energia entre eles. Se a diferença de energia entre dois sítios 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, o elétron pode mover-se com facilidade entre eles. No entanto, se a diferença de energia entre os sítios for maior que  $B/z$ , não haverá transporte eletrônico entre eles pois, tais sítios estão efetivamente desacoplados.

De uma forma mais geral, a natureza da localização da função dos estados eletrônicos depende da dimensão da rede em estudo. Esta dependência foi mostrada através da Teoria de Escala, por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan em 1979 [4], onde eles utilizaram uma reformulação do modelo de Anderson original feita por Thouless [21] em 1974. Utilizando esta teoria, eles mostraram que para qualquer quantidade de desordem, não existe transição metal-isolante em sistemas com dimensão menor que 2, e que pode existir uma transição metal-isolante em sistemas 3D, se a largura da desordem for menor do que um valor crítico  $W_c$ .

Diversos estudos têm comprovado as previsões do modelo de Anderson, tanto por métodos analíticos quanto por métodos numéricos. No entanto, estudos recentes sugerem que reformulações neste modelo, com a inclusão de correlações na desordem da rede ou nas amplitudes de hopping, apresentam como resultado mais significativo a existência de uma transição metal-isolante mesmo em sistemas 1D e 2D. Na próxima seção iremos discutir mais detalhadamente a inclusão de correlações na distribuição da desordem em uma rede unidimensional.

## 2.2 O modelo de Anderson 1D com correlações na desordem

Vários trabalhos propostos recentemente [15, 17, 22, 23, 24] despertaram grande interesse da comunidade científica, pois indicam que a presença de correlações na desordem são responsáveis por um comportamento não usual do modelo de Anderson uni-dimensional. Nos últimos anos, alguns estudos têm indicado que correlações de curto alcance na distribuição da desordem, podem induzir ao surgimento de estados estendidos em algumas energias ressonantes [15, 20, 23, 25, 26, 27]. No entanto, estes estados formam um conjunto que não contribui para a densidade de estados no limite termodinâmico. Por outro lado, correlações de longo alcance podem induzir uma transição metal-isolante em sistemas 1D [17, 18, 19, 28, 29, 30]. Nesta seção, iremos estudar os efeitos no modelo de Anderson original causados pela inclusão de correlações de longo alcance na distribuição das energias dos sítios de uma rede unidimensional.

Iremos utilizar aqui uma estratégia que consiste em considerar um sistema 1D com interações apenas entre primeiros vizinhos e correlações de longo alcance na distribuição de desordem. Esta distribuição apresenta (aproximadamente) uma densidade espectral do tipo  $S(k) = k^{-\alpha}$ , onde  $k = 1/\lambda$  e  $\lambda$  é o comprimento de onda das ondulações no potencial. O parâmetro  $\alpha$  mede o grau de correlação da distribuição das energias. Tal espectro é obtido através de uma transformada de Fourier discreta da função correlação das energias de dois sítios  $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ . A sequência dos nucleotídeos da molécula de DNA parece ser um exemplo natural de uma sequência com ruído do tipo  $S(k) = k^{-\alpha}$  [31, 32]. No próximo capítulo, apresentaremos alguns resultados que indicam que a natureza estendida ou localizada da função de onda depende do valor de  $\alpha$  para a distribuição das energias da rede.

Para introduzirmos correlações de longo alcance no modelo de Anderson unidi-

mensional, iremos considerar a sequência aleatória das energias da rede como sendo passos em um movimento Browniano fracionário.

### 2.2.1 Movimento Browniano fracionário

O conceito de movimento Browniano fracionário (MBF) foi introduzido por Mandelbrot [33, 34], como generalização de uma função aleatória  $x(t)$ . Se  $x(t)$  representa a posição de uma partícula em um movimento Browniano fracionário num instante  $t$ , vamos considerar que  $x(0) = 0$  e denotar  $C(t)$  como sendo a função que mede a correlação entre os incrementos no futuro  $x(t)$  e incrementos no passado  $-x(-t)$ . Então, a expressão para  $C(t)$  é

$$C(t) = \left[ \frac{\langle -x(-t)x(t) \rangle}{x(t)^2} \right] = 2^{2H-1} - 1, \quad (2.10)$$

onde  $H$  é chamado de expoente de Hurst. Podemos ver que para  $H = 1/2$ , temos  $C(t) = 0$  e com isso recuperamos o movimento Browniano simples, onde não existe correlações entre os incrementos na posição no decorrer do tempo. Para  $0 < H < 1$ , o movimento é um MBF.

Podemos gerar a densidade espectral tipo lei de potencia  $S(w) = w^{-\alpha}$  aplicando uma transformada de Fourier discreta na sequência  $x_i(t)$  [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42], e obtendo a equação abaixo

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(w_k)\Delta w)^{1/2} \cos(w_k t_n + \phi_k). \quad (2.11)$$

As frequências  $w_k$  são múltiplos da frequência fundamental  $\Delta w = 2\pi/T$ , ou seja,  $w_k = k\Delta w$ . A única fonte de ruído da série  $x_n(t)$  é representada pelas  $N/2$  fases  $\phi_k$ , que estão distribuídas uniformemente no intervalo  $[0, 2\pi]$ . Vamos supor que a posição da partícula seja observada nos instantes  $t_i = i\tau$ , e que tenha  $N$  valores num período  $T = N\tau$ . Por conveniência, faremos  $\tau = 1$  e com isso  $t_i = i$  e  $T = N$ .

Faremos também  $w_k = k\Delta w$ ,  $S(w_k) = w_k^{-\alpha} = k^{-\alpha}(\Delta w)^{-\alpha}$  e  $\Delta w = 2\pi/T = 2\pi/N$ .

Com isso temos

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\alpha} \left( \frac{2\pi}{N} \right)^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi nk}{N} + \phi_k \right). \quad (2.12)$$

O parâmetro  $\alpha$  controla as correlações desta sequência e está relacionado com o expoente de Hurst da forma  $\alpha = 2H + 1$ . Temos um ruído branco quando  $\alpha = 0$ , onde a sequência aleatória não apresenta correlações entre os eventos. Por outro lado, recuperamos o movimento Browniano simples quando  $\alpha = 2$ , onde não há correlações entre os incrementos.

Já vimos que para reproduzirmos o modelo de Anderson original, temos que escolher aleatoriamente as energias sobre os sítios dentro de um intervalo de largura  $W$ . Estes valores assumidos pelas energias não são correlacionados. Para introduzirmos correlações de longo alcance no modelo de Anderson vamos utilizar os incrementos de um movimento Browniano fracionário, como foi mostrado acima na Eq. (2.12), para distribuir as energias sobre os sítios em uma rede unidimensional. Portanto, as energias dos sítios serão da forma

$$e_i(t) = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\alpha} \left( \frac{2\pi}{N} \right)^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi ik}{N} + \phi_k \right). \quad (2.13)$$

A Fig. 2.1(a) mostra uma distribuição de energias de uma rede de 2000 sítios para alguns valores de  $\alpha$ , enquanto que a Fig. 2.1(b) mostra a densidade espectral  $S(k)$  em função de  $k$  para os respectivos valores do parâmetro de correlação  $\alpha$ .

Este tipo de distribuição correlacionada foi utilizado por Moura e Lyra em 1998 [17]. Neste trabalho foi mostrado, pela primeira vez, a existência de fases estendidas mesmo em uma rede unidimensional, em contraste com as previsões do modelo de Anderson original. Eles mostraram também que a existência de autoestados estendidos na rede dependem de um certo valor crítico  $\alpha_c = 2$ . Também neste mesmo

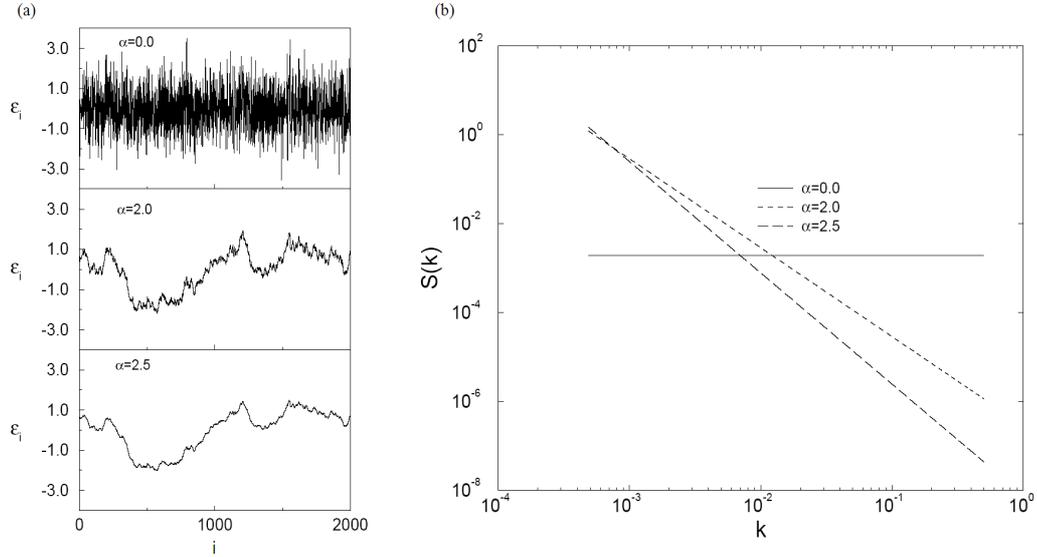


Figura 2.1: (a) Distribuição de energias gerada pela Eq. (2.13) com  $N = 2000$ . No primeiro quadro ( $\alpha = 0.0$ ) temos uma sequência aleatória sem correlações entre as energias. No segundo ( $\alpha = 2.0$ ) temos um traço de um movimento Browniano simples, e no último quadro ( $\alpha = 2.5$ ) temos um traço de um movimento Browniano fracionário; (b) densidade espectral  $S(k)$  obtida computacionalmente, em escala log-log, para  $\alpha = 0.0, 2.0, 2.5$ . Podemos notar o comportamento tipo lei de potência ( $S(k) \propto 1/k^\alpha$ ).

trabalho, foi sugerido que este valor crítico de  $\alpha$  não é uma quantidade universal e que apresenta uma dependência exponencial com a variância da desordem  $\Delta\epsilon_i$ , onde  $(\Delta\epsilon_i)^2 = \langle \epsilon_i^2 \rangle - \langle \epsilon_i \rangle^2$ .

No próximo capítulo, mostraremos alguns resultados a respeito da dinâmica eletrônica no modelo de Anderson unidimensional, onde a desordem é distribuída pelo sistema através de um movimento Browniano fracionário, onde o parâmetro  $\alpha$  controla as correlações na desordem diagonal do Hamiltoniano.

# Capítulo 3

## Dinâmica eletrônica no modelo de Anderson 1D

### 3.1 Introdução

Este capítulo é dedicado a uma descrição dos métodos teóricos e computacionais, e aos cálculos de algumas quantidades necessárias a uma descrição das características de transporte eletrônico no modelo de Anderson unidimensional, com correlações de longo alcance na distribuição da desordem. Calcularemos a probabilidade de retorno a origem  $R(t)$ , o desvio médio quadrático  $\sigma^2(t)$ , a função participação  $\xi(t)$  e a entropia de Shannon  $E(t)$  para o modelo de Anderson correlacionado. O procedimento para o cálculo dessas quantidades consiste basicamente em considerar que em  $t = 0$ , em uma cadeia atômica de  $N$  sítios, o elétron se encontra em um sítio  $m$ , tal que  $|c_m|^2 = 1$ , e  $c_i = 0$  para  $i \neq m$ . A dinâmica eletrônica deste sistema é descrita pela equação de Schrödinger dependente do tempo

$$E c_i = i\hbar \dot{c}_i = \epsilon_i c_i + T_{i-1,i} c_{i-1} + T_{i,i+1} c_{i+1}. \quad (3.1)$$

Por questão de conveniência na resolução numérica, costuma-se fixar  $\hbar = 1$ . Se considerarmos que existem amplitudes de hopping apenas entre os primeiros vizinhos, e iguais a 1, a Eq. (3.1) pode ser escrita como

$$i\dot{c}_i = \epsilon_i c_i + (c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (3.2)$$

A probabilidade de o pacote eletrônico retornar até a origem (no sítio  $m$ ) é dada pela probabilidade de retorno:

$$R(t) = |c_m(t)|^2. \quad (3.3)$$

Quando a função de onda do elétron se encontra localizada, temos  $R(\infty) = 1$ , enquanto que  $R(\infty) \rightarrow 0$  a medida em que a função de onda se estende pela cadeia.

O desvio médio quadrático nos dá uma idéia do alargamento do pacote eletrônico pela cadeia e é dado por

$$\sigma^2(t) = \sum_{i=1}^N (i - m)^2 |c_i(t)|^2. \quad (3.4)$$

Normalmente  $\sigma(t)$  segue uma lei de potência do tipo  $\sigma(t) \propto t^\gamma$ . Quando  $\gamma = 0$ , o pacote de onda permanece localizado no sítio inicial. Quando  $0 < \gamma < 1/2$ , o alargamento do pacote de onda é subdifusivo, sendo difusivo quando  $\gamma = 1/2$ . Quando  $1/2 < \gamma < 1$  temos um comportamento superdifusivo. Finalmente,  $\gamma = 1$  corresponde a um movimento balístico do pacote e  $\gamma > 1$  corresponde a um movimento superbalístico. Veremos que quando o sistema em estudo se encontra em fase metálica, ou seja, a função de onda se encontra estendida pela cadeia, temos  $\sigma^2(t) \propto t^2$ , e o movimento do pacote de onda é balístico, pois  $\sigma(t) \propto t$ .

A entropia de informação de Shannon nos dá uma medida de nossa "desinformação" sobre a localização do pacote de onda na cadeia. Ela é dada por

$$E(t) = - \sum_i |c_i(t)|^2 \log |c_i(t)|^2. \quad (3.5)$$

Para funções de onda estendidas por toda a cadeia, o valor da entropia de Shannon aumenta no decorrer do tempo até um valor limite, que depende do número de sítios, enquanto que, se a função de onda encontra-se localizada em uma determinada região da cadeia, o valor da entropia de Shannon se mantém próximo de zero, ou seja,  $E(t \rightarrow \infty) \simeq 0$ . Podemos dizer que  $0 < S(t) < \ln N$ .

Por fim, a função participação se relaciona com o número de sítios onde a amplitude da função de onda tem valor relevante ( $\psi \neq 0$ ). Ela tem a forma

$$\xi(t) = \frac{1}{\sum_i |c_i|^4}. \quad (3.6)$$

Para funções de onda estendidas, a participação é aproximadamente igual ao número de sítios, ou seja,  $\xi(t \rightarrow \infty) \simeq N$ . No entanto, para funções de onda localizadas, temos  $\xi(t \rightarrow \infty) \simeq 0$ .

## 3.2 Resultados e discussão

Nesta seção, discutiremos os resultados obtidos pelos cálculos do conjunto de equações de movimento acopladas de um elétron em uma rede unidimensional<sup>1</sup>, utilizando o método de Runge-Kutta de quarta-ordem. Iremos analisar três regimes distintos relacionados com três diferentes intervalos do parâmetro  $\alpha$ . Estes intervalos são: ( $\alpha < 1$ ), ( $1 < \alpha < 2$ ) e ( $\alpha > 2$ ).

Iremos considerar um pacote de onda inicialmente localizado em um sítio no centro da cadeia  $m_0 = N/2$ , onde  $N$  é o número de sítios da rede. A distribuição dos potenciais da rede<sup>2</sup> seguiu os passos descritos no capítulo anterior, onde con-

<sup>1</sup>Equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo.

<sup>2</sup>Ou seja, a distribuição da desordem

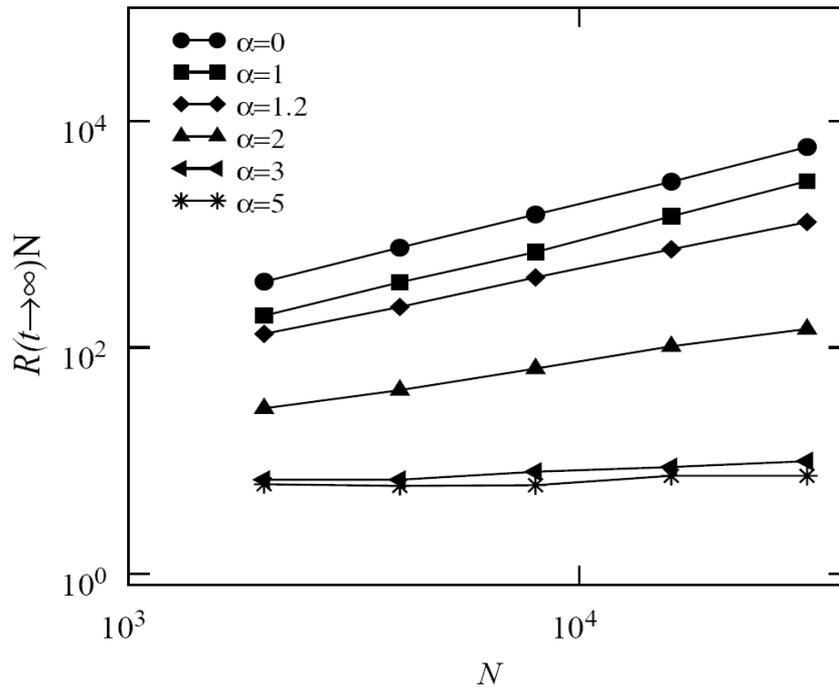


Figura 3.1: A probabilidade de retorno escalada  $R(t \rightarrow \infty)N$ , vs. número de sítios  $N$ , para diferentes valores de  $\alpha$ . Podemos ver que  $R(t \rightarrow \infty)N$  permanece constante para  $\alpha > 2$ , o que indica que a probabilidade de retorno  $R(t \rightarrow \infty)$  deve cair com  $1/N$ . Isto é um indício de uma transição metal-isolante induzida por correlações de longo-alcance nas energias dos sítios da rede unidimensional.

sideramos cada potencial como um passo de um movimento Browniano fracionário (MBF).

Na Fig. 3.1, mostramos a probabilidade de retorno  $R(t)$  para um tempo infinito, em função do número de sítios  $N$ , para vários graus de correlação  $\alpha$ . Podemos ver nesta figura que para correlações fracas ( $\alpha < 1$ ), a probabilidade de retorno não vai a zero no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Para fortes correlações ( $\alpha > 2$ ), a probabilidade de retorno vai a zero linearmente com  $1/N$ .

A Fig. 3.2 mostra o desvio médio quadrático reescalado  $\sigma^2(t)/t^2$  para  $\alpha = 0.5, 1.2, 3$ , em uma rede de 2000 sítios. Podemos notar nesta figura que para  $\alpha = 3$ , o desvio médio quadrático reescalado  $\sigma^2(t)/t^2$  permanece constante quando  $t \rightarrow \infty$ , ou

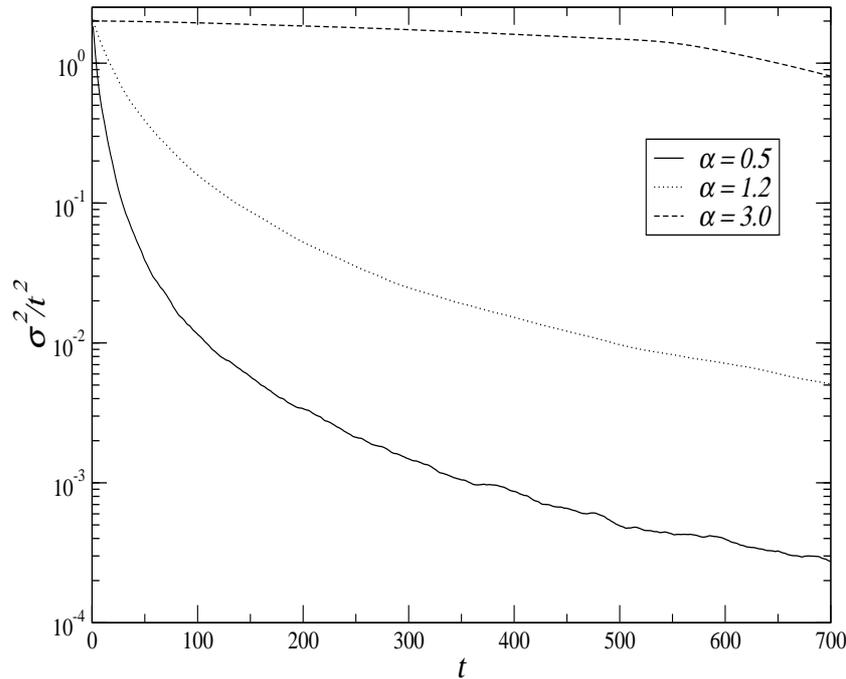


Figura 3.2: Desvio médio quadrático reescalado  $\sigma^2(t)/t^2$ , para  $\alpha = 0.5, 1.2, 3$  e  $N = 2000$  sítios. Observe que para  $\alpha = 3$ , temos  $\sigma^2(t) \propto t^2$ .

seja,  $\sigma^2(t) \propto t^2$ . Como dissemos na seção anterior, este comportamento é balístico e difunde o pacote de onda por toda a cadeia. Para  $\alpha < 2$ , o desvio médio quadrático apresenta um comportamento típico de localização.

Na Fig. 3.3(a) mostramos a entropia de Shannon  $S(t)$ , versus  $\ln t$  para  $\alpha = 0.1$  e  $\alpha = 3$ . Note que para  $\alpha = 3$ , temos  $S(t) \propto \ln t$  e a entropia de Shannon só satura em valor próximo ao valor limite da entropia  $\ln N$ . Isto confirma a existência de uma fase de estados estendidos no regime de forte correlação, onde  $\alpha > 2$ . Para  $\alpha = 0.1$ , valor que está situado no intervalo de fraca correlação ( $\alpha < 1$ ), a entropia de Shannon satura em um valor muito menor que  $\ln N$ , o que indica que o pacote de onda é localizado para fracas correlações. A existência de uma fase de estados estendidos para  $\alpha > 2$  também é revelada na Fig. 3.3(b). Nela vemos que para  $\alpha > 2$ , a entropia de Shannon no estado estacionário ( $t \rightarrow \infty$ ) é proporcional ao

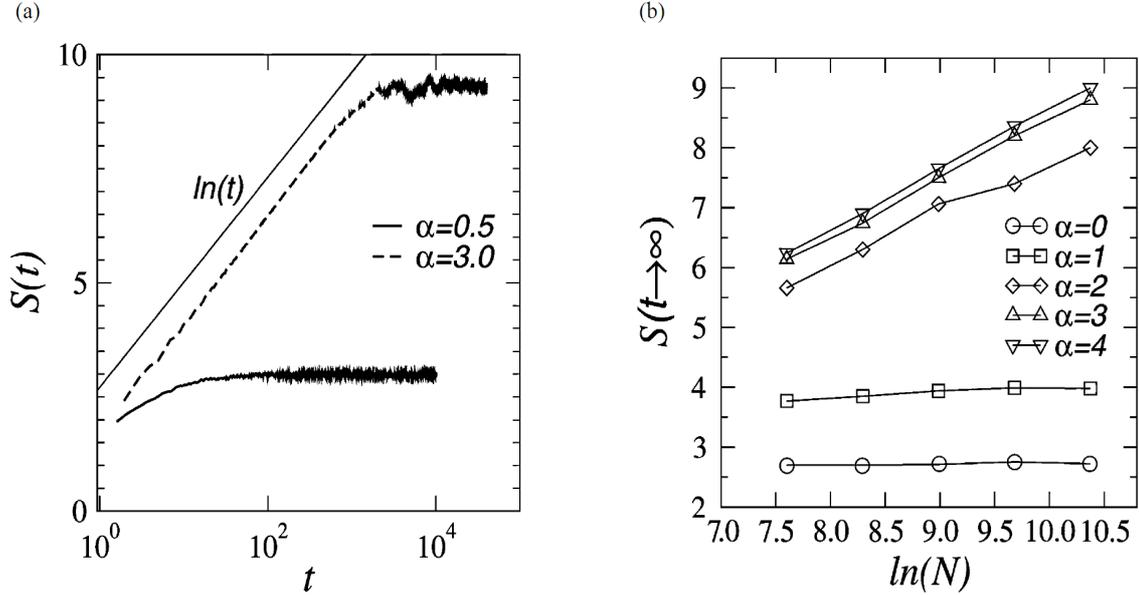


Figura 3.3: (a) Entropia de informação de Shannon  $S(t)$ , versus  $\ln t$  para  $\alpha = 3$  (linha pontilhada) e  $\alpha = 0.5$  (linha contínua), com  $N = 8000$  sítios.  $S(t)$  evolui com  $S(t) \propto \ln t$  no regime de forte correlação  $\alpha = 3$ ; (b) entropia de informação de Shannon assintótica  $S(t \rightarrow \infty)$ , versus  $\ln N$ , para diferentes valores de  $\alpha$ . Vemos que  $S(t \rightarrow \infty)$  é proporcional a  $\ln N$  no regime de forte correlação  $\alpha > 2$ , e permanece finita para fracas correlações.

$\ln N^3$ .

A figura 3.4 mostra resultados numéricos para a função participação reescalada  $\xi(t)/N^\gamma$  versus o tempo reescalado para diversos tamanhos de rede. Podemos ver na Fig. 3.4(c), onde  $\alpha = 3$  que o colapso dos dados para  $\xi(t)/N$  vs.  $t/N$  indicam que a participação é independente do tamanho da rede e que ela se satura em um valor próximo a  $N^4$ . Além disso, vemos também que o expoente de escala usado para obtermos o colapso dos dados na figura indica que a participação cresce linearmente com o tempo,  $\xi(t) \propto t$ . Isto indica que o pacote de onda alarga-se balisticamente até

<sup>3</sup>Isto é uma conclusão plausível pois, se uma variável qualquer (dependente do tempo) é proporcional ao seu valor limite quando  $t \rightarrow \infty$ , seu valor limite foi alcançado. Lembre-se que dissemos na seção anterior que  $\ln N$  é o valor limite de  $S(t)$ .

<sup>4</sup>Ou em um valor próximo a 1, no caso da participação reescalada  $\xi(t)/N$ .

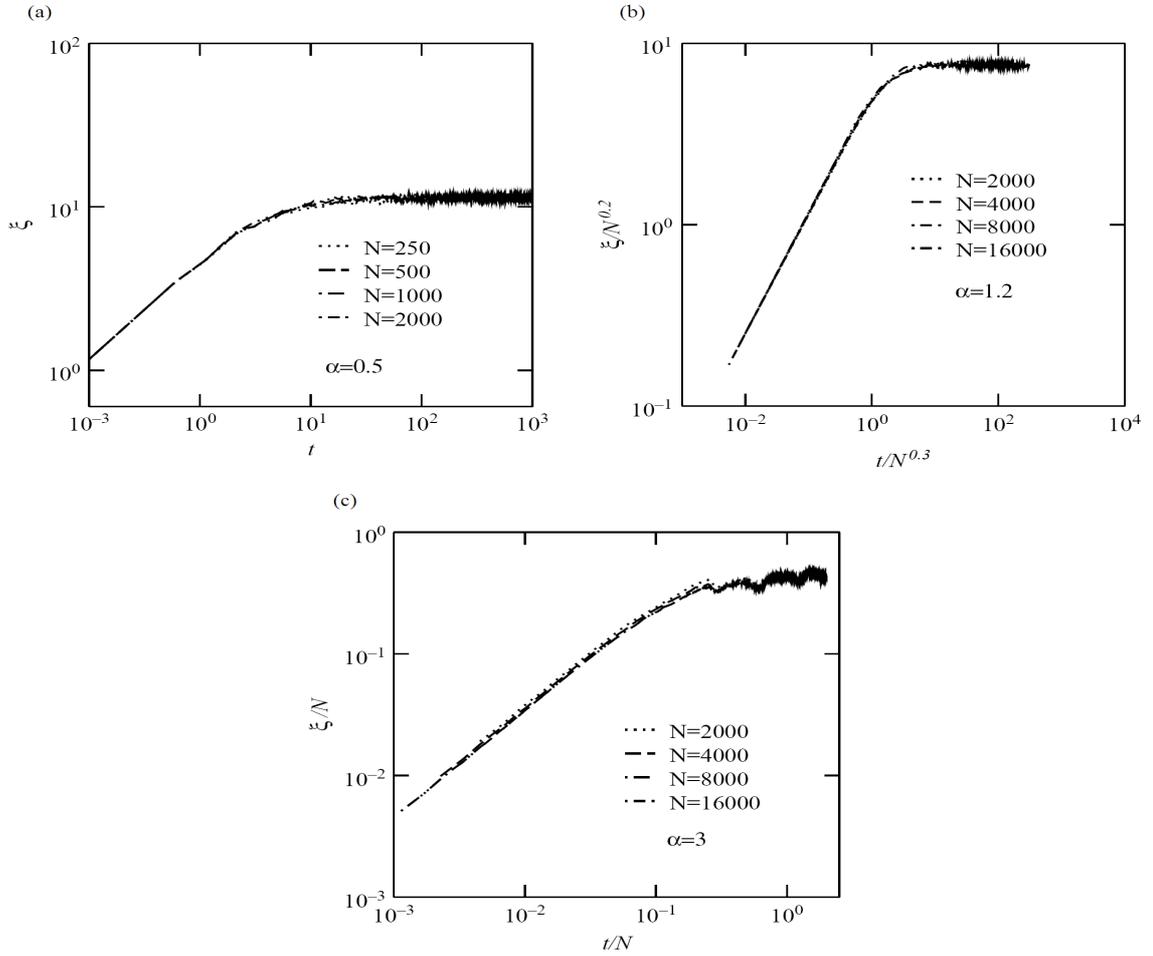


Figura 3.4: (a) Função participação  $\xi(t)$  como função do tempo  $t$  para  $\alpha = 0.5$ . A não-dependência com o tamanho da rede  $N$  reflete a natureza localizada do pacote de onda. Antes da saturação, a participação evolui difusivamente; (b) função participação reescalada  $\xi(t)/N^{0.2}$  como função do tempo rescalado  $t/N^{0.3}$ , para  $\alpha = 1.2$ . O colapso dos dados indicam um alargamento superdifusivo do pacote de onda; (c) função participação reescalada  $\xi(t)/N$  como função do tempo rescalado  $t/N$ , para  $\alpha = 3$ . O colapso dos dados indicam que a participação evolui balisticamente até o pacote de onda ser refletido nos limites da cadeia.

atingir os contornos da rede. Se analisarmos outros resultados para  $\alpha > 2$ , que não mostramos aqui, podemos concluir que o elétron apresenta uma dinâmica balística, que está associada com o surgimento de autoestados estendidos por toda a rede. A

Fig. 3.4(a) sugere que no regime de fracas correlações,  $\alpha < 1$ , todos os autoestados eletrônicos permanecem localizados em um segmento finito a medida em que o tempo evolui, e portanto, é independente do tempo. Podemos ver na figura que, antes da saturação, o pacote de onda alarga-se difusivamente com  $\xi(t) \propto t^{1/2}$ . A Fig. 3.4(b) mostra o colapso dos dados para  $\alpha = 1.2$ . Nós podemos identificar nesta figura um novo regime para valores intermediário do expoente de correlação  $\alpha$ . Os expoentes de escala desta figura indicam que o pacote de onda exhibe um alargamento superdifusivo  $\xi(t) \propto t^{2/3}$ , antes da saturação. Devemos enfatizar, no entanto, que mesmo neste regime os autoestados do elétron ainda são exponencialmente localizados. Apenas para  $\alpha > 2$  os autoestados apresentam caráter estendido<sup>5</sup>.

### 3.3 Variações do modelo de Anderson: interação elétron-fônon

Como já dissemos anteriormente, desde que Anderson propôs seu modelo em 1958 [5], algumas variações têm sido extensivamente estudadas até então. Podemos citar, por exemplo, os modelos com a inclusão de correlações tanto na desordem diagonal (energias dos sítios) [17, 24, 43, 44] como na desordem fora da diagonal (amplitudes de hopping) [45, 46], e também com correlações entre as energias dos sítios e as amplitudes de hopping [23]. Alguns trabalhos também têm sido publicados com estudos realizados em redes do tipo dímeros [15, 16, 20, 22, 47, 48, 49, 50]. Neste tipo de rede, as energias dos sítios podem assumir apenas dois valores  $\epsilon_a$  ou  $\epsilon_b$ , com probabilidades  $p$  e  $1 - p$ , respectivamente. Essas energias sempre aparecem aos pares na rede. Uma outra variação do modelo de Anderson original também têm chamado a atenção da comunidade científica. Trata-se do modelo de Anderson

---

<sup>5</sup>Enfatizamos também que o valor crítico de  $\alpha$ , como já foi dito no capítulo anterior, parece apresentar uma dependência exponencial com a variância das energias, e que o valor crítico  $\alpha_c = 2$  corresponde a variância  $\Delta\epsilon_i = 1$ .

correlacionado, mas com um ingrediente adicional, a presença de interações entre os elétrons e os modos vibracionais quantizados da rede, os *fônons*.

Em adição aos resultados obtidos para o modelo de Anderson 1D correlacionado, iremos apresentar nesta seção alguns resultados obtidos para o modelo de Anderson 1D com correlações na desordem e interação elétron-fônon. Este tipo de estudo é de grande importância em diversas áreas em física da matéria condensada [51, 52]. Nosso objetivo nesta seção não é apresentar uma descrição detalhada da natureza deste tipo de interação. Em vez disso, nossa preocupação será apenas com o estudo das propriedades de localização, e com a solução numérica da equação de movimento de um elétron sujeito a este tipo de interação. Como já vimos, o modelo de Anderson prevê que a função de onda de um elétron movendo-se em uma rede unidimensional desordenada é localizada para qualquer grau de desordem. No entanto, podemos ver que a equação de Schrödinger para um elétron neste modelo (Eq. (3.2)) apresenta apenas termos lineares. A inclusão de não-linearidade nesta equação de movimento surge quando consideramos a interação dos elétrons com os fônons da rede. Nosso objetivo aqui é analisar as propriedades de transporte e localização em um sistema unidimensional, com acoplamento elétron-fônon no Hamiltoniano do sistema. Quando o termo que descreve a interação elétron-fônon está acoplado aos termos que estão na diagonal do Hamiltoniano do sistema, chamamos este acoplamento de não-linearidade diagonal. No entanto, quando tal termo é acoplado aos elementos não-diagonais, este acoplamento é chamado de não-linearidade não-diagonal. Para descrever um elétron movendo-se neste sistema (uma cadeia unidimensional) iremos utilizar o Hamiltoniano SSH (Hamiltoniano de Su-Schrieffer-Heeger [52])

$$H = \frac{1}{2}M \sum_i |\dot{u}_i|^2 + \frac{1}{2}K \sum_i (u_i - u_{i+1})^2 + \sum_i T_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (3.7)$$

O primeiro termo do lado direito é a energia cinética do movimento dos átomos na cadeia. O segundo termo é a energia de ligação dos átomos da cadeia. Nosso

estudo se concentrou no caso em que o termo que descreve a interação elétron-fônon é acoplado com os termos de hopping no Hamiltoniano do sistema. Em outras palavras, nós investigamos as propriedades de localização de um sistema descrito por este Hamiltoniano SSH com um acoplamento elétron-fônon. No último termo da Eq. (3.7), vamos expandir a integral de hopping  $T_{ij}$  em primeira ordem da forma

$$T_{ij} = T_0 + \alpha(u_i - u_{i+1}), \quad (3.8)$$

onde  $\alpha$  é a constante de acoplamento elétron-fônon e  $T_0$  é a integral de hopping intrínseca, ou seja, a integral de hopping para um sistema em que os elétrons não interagem com os fônons da rede. Omitimos os índices  $i$  e  $j$  em  $T_0$ , para indicar que as integrais de hopping são iguais entre quaisquer sítios  $i$  e  $j$ . Quando a interação com os fônons é considerada, é necessário um termo de correção para a integral de hopping  $T_{ij}$ , que na Eq. (3.8) está caracterizada por  $\alpha(u_i - u_{i+1})$ . Substituindo a Eq. (3.8) na Eq. (3.7) temos

$$H = \frac{1}{2}M \sum_i |\dot{u}_i|^2 + \frac{1}{2}K \sum_i (u_i - u_{i+1})^2 + \sum_i [T_0 + \alpha(u_i - u_{i+1})] |i \rangle \langle j|. \quad (3.9)$$

Utilizamos este Hamiltoniano quando a rede em estudo é periódica. De uma maneira geral o Hamiltoniano acima apresenta um termo relacionado com o potencial em cada sítio da rede, de forma que o Hamiltoniano (3.9) torna-se

$$H = \sum_i \epsilon_i |i \rangle \langle i| + \frac{1}{2}M \sum_i |\dot{u}_i|^2 + \frac{1}{2}K \sum_i (u_i - u_{i+1})^2 + \sum_i [T_0 + \alpha(u_i - u_{i+1})] |i \rangle \langle j|. \quad (3.10)$$

No entanto, para uma rede periódica, podemos fixar todas as energias dos sítios iguais a zero, sem perda de generalidade. Este termo adicional (1º termo do lado

direito da Eq. (3.10)) só é levado em consideração quando a rede em estudo é desordenada, onde as energias  $\epsilon_i$  estão distribuídas aleatoriamente em um intervalo de largura  $W$ .

Ao resolvermos a equação de Schrödinger  $H\psi = E\psi$ , onde  $\psi = \sum_i c_i|i\rangle$ , temos

$$i\dot{c}_i = \epsilon_i c_i + T_0(c_{i-1} + c_{i+1}) + \nu(|c_{i-1}|^2 + |c_i|^2)c_{i-1} + \nu(|c_i|^2 + |c_{i+1}|^2)c_{i+1}, \quad (3.11)$$

Esta equação é denominada equação de Schrödinger não-linear modificada (MNLSE<sup>6</sup>), e é muito utilizada para descrever o movimento de um elétron em uma rede unidimensional com interação elétron-fônon acoplada aos termos que estão fora da diagonal do Hamiltoniano (3.10). Na Eq. (3.11),  $\nu$  é o parâmetro de não-linearidade que descreve o acoplamento elétron-fônon no sítio  $i$ . Podemos ver que quando  $\nu = 0$  e as energias  $\epsilon_i$  são distribuídas aleatoriamente sem correlações, recuperamos o modelo de Anderson original, onde todos os autoestados dos elétrons são localizados [5]. Uma propriedade interessante que se origina da interação elétron-fônon é o fenômeno de *self-trapping*<sup>7</sup>. Neste fenômeno, a amplitude da função de onda de um elétron permanece localizada em um único sítio, mesmo quando  $t \rightarrow \infty$ . Assim a probabilidade de encontrar uma partícula no sítio inicial é sempre diferente de zero.

Faremos aqui uma breve investigação da MNLSE mostrando alguns resultados que obtivemos em sua integração numérica tanto para uma rede periódica (sem desordem) quanto para uma rede desordenada (modelo de Anderson). Em nossos cálculos nossa rede foi composta de 5000 sítios com o elétron encontrando-se inicialmente localizado no sítio 2500. Assim como no caso com correlações na desordem diagonal do Hamiltoniano e sem interação elétron-fônon, o método utilizado na integração da Eq. (3.11) foi o método de Runge-Kutta de quarta-ordem.

<sup>6</sup>Esta sigla vem da denominação em inglês: Modified Nonlinear Schrödinger Equation.

<sup>7</sup>Ou, *auto-aprisionamento* se preferir.

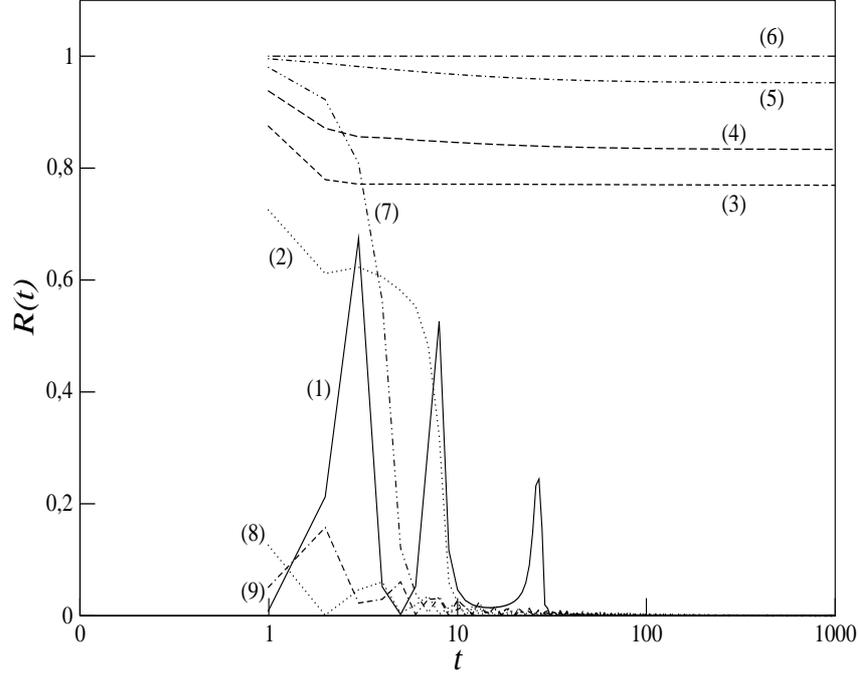


Figura 3.5: Evolução temporal da probabilidade de retorno em uma rede periódica para vários parâmetros não-lineares. Os parâmetros não-lineares são: (1)  $-3.0T_0$ , (2)  $-1.4T_0$ , (3)  $-1.3T_0$ , (4)  $-1.2T_0$ , (5)  $-1.05T_0$ , (6)  $-1.0T_0$ , (7)  $-0.9T_0$ , (8) 0 e (9)  $1.05T_0$ . As curvas (3)-(6) representam estados de self-trapping. As outras curvas decaem rapidamente.

### 3.3.1 Propriedades da MNLSE em uma rede periódica

Aqui, iremos investigar brevemente as propriedades dinâmicas da MNLSE em uma rede periódica. Sem perda de generalidade, nós fixamos na MNLSE todas as energias dos sítios iguais a zero e fizemos todos os parâmetros não-lineares assumirem valores iguais em todos os sítios. Por conveniência, fixamos também  $T_0 = 1$ , de forma que a MNLSE para este caso torna-se

$$i\dot{c}_i = (c_{i-1} + c_{i+1}) + \nu(|c_{i-1}|^2 + |c_i|^2)c_{i-1} + \nu(|c_i|^2 + |c_{i+1}|^2)c_{i+1}. \quad (3.12)$$

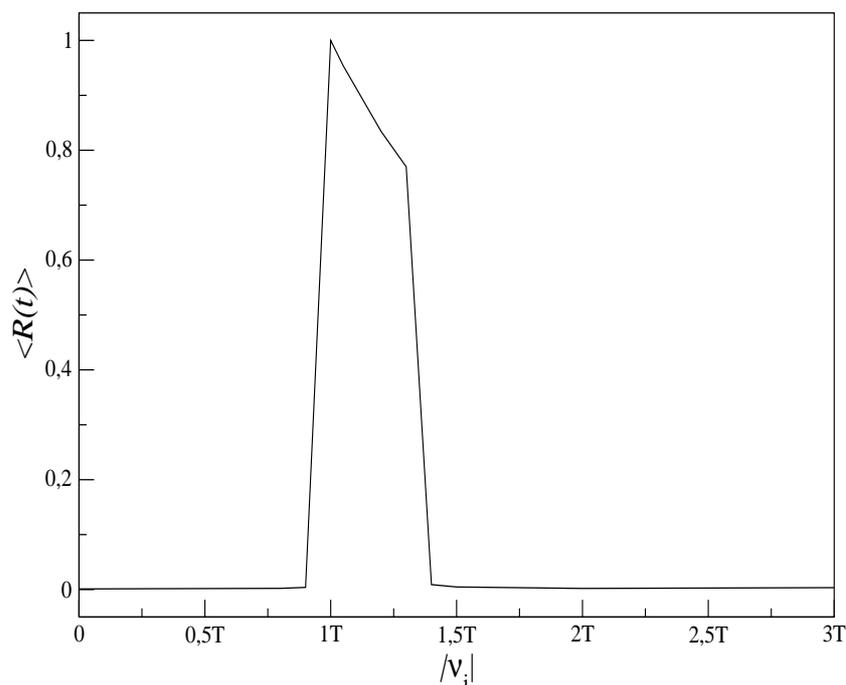


Figura 3.6: Dependência da média da probabilidade de retorno com o parâmetro não-linear. A média da probabilidade de retorno é diferente de zero apenas quando  $|\nu|$  está no intervalo  $[T_0, 1.4T_0]$ . Observe a mudança abrupta em  $\langle R(t) \rangle$  quando  $|\nu| = 1.0T_0$  e  $|\nu| = 1.4T_0$ .

A Fig. 3.5 mostra como a probabilidade de retorno  $R(t)$  de uma partícula ao sítio inicial varia com o tempo para diferentes valores de parâmetros não-lineares  $\nu$ . Podemos ver que quando  $\nu$  é negativo, mas fora do intervalo  $[-1.4T_0, T_0]$ ,  $R(t)$  mantém um valor significativo por algum tempo e depois decai rapidamente a zero. Vemos também que para  $\nu = -1.0T_0, -1.05T_0, -1.2T_0, -1.3T_0$ , ocorre o fenômeno de self-trapping.

A Fig. 3.6 mostra a dependência da média da probabilidade de retorno com o parâmetro não-linear. Podemos ver que  $\langle R(t) \rangle = 0$  quando  $|\nu| < T_0$  e  $|\nu| > 1.4T_0$ . Quando  $|\nu| = T_0$ ,  $\langle R(t) \rangle$  é exatamente igual a 1.0 em qualquer instante, o que significa que a partícula está completamente presa ao sítio inicial. Os resultados de ambas as figuras (3.5 e 3.6) estão de acordo com os resultados adquiridos na

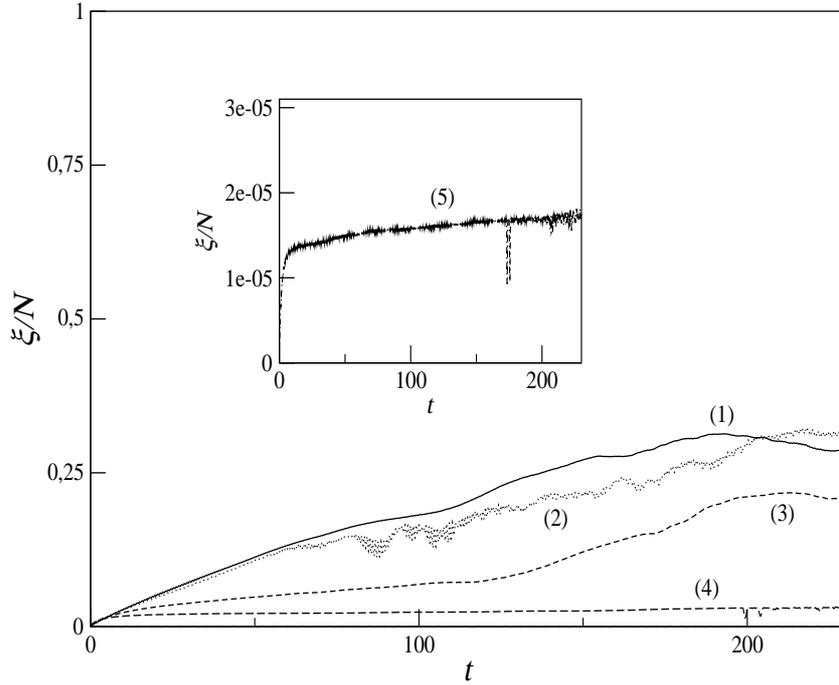


Figura 3.7: Evolução temporal da função participação em uma cadeia de 1000 sítios, com  $\alpha = 3$ . Os parâmetros de não-linearidade são: (1) 0, (2)  $T_0$ , (3)  $2T_0$ , (4)  $3T_0$  e (5)  $4T_0$ . Mesmo neste regime de forte correlação ( $\alpha = 3$ ), um aumento no valor de  $\nu$  localiza a função de onda. Isto está enfatizado pela curva (5).

literatura [51].

### 3.3.2 Propriedades da MNLSE em uma rede desordenada

Para o modelo de Anderson com correlações na desordem, a MNLSE a se resolver é

$$i\dot{c}_i = \epsilon_i c_i + (c_{i-1} + c_{i+1}) + \nu(|c_{i-1}|^2 + |c_i|^2)c_{i-1} + \nu(|c_i|^2 + |c_{i+1}|^2)c_{i+1}. \quad (3.13)$$

onde as energias  $\epsilon_i$  assumem agora valores aleatórios, mas correlacionados.

A Fig. 3.7 mostra a participação normalizada com o número de sítios  $N$  para

uma rede de 1000 sítios, e para vários valores de  $\nu$ . Nela observamos que a participação decresce quando aumentamos o valor de  $\nu$  de  $\nu = 0$  até  $\nu = 4T_0$ . Vemos então que para  $\nu > 0$ , um aumento na interação elétron-fônon com não-linearidade não-diagonal localiza a função de onda deste elétron, mesmo no regime de forte correlação ( $\alpha > 2$ ). Podemos concluir a princípio que no modelo de Anderson 1D com desordem diagonal correlacionada, a inclusão de interação elétron-fônon com não-linearidade não-diagonal pode localizar a função de onda de um elétron, onde o efeito de localização está caracterizado pelo domínio da não-linearidade não-diagonal sobre a correlação nas energias da MNLSE (Eq. 3.13). Como vimos antes, este efeito de localização também ocorre no caso de uma rede periódica em que o parâmetro de não-linearidade está dentro do intervalo em que ocorre o fenômeno de self-trapping.

Nesta seção analisamos algumas propriedades dinâmicas da MNLSE estudando a evolução temporal de um pacote de onda em uma rede periódica e em uma rede desordenada. Na rede periódica os resultados mostraram que o fenômeno de self-trapping ocorre quando o parâmetro de não-linearidade não-diagonal  $\nu$  é negativo e está dentro do intervalo  $[-1.4T_0, -T_0]$ . Este resultado é diferente daqueles encontrados com não-linearidade diagonal, em que o self-trapping ocorre quando o parâmetro de não-linearidade é maior que um certo valor crítico [51]. Para uma rede desordenada, a combinação entre não-linearidade não-diagonal e desordem diagonal pode localizar a função de onda mesmo no regime de forte correlação ( $\alpha > 2$ ). Isto também difere dos resultados para não-linearidade diagonal onde a combinação com a desordem diagonal pode destruir a localização da função de onda.

# Capítulo 4

## Conclusões e perspectivas

Neste trabalho analisamos os efeitos de correlações de longo-alcance no modelo de Anderson unidimensional. no modelo de Anderson a teoria de escala prevê estados localizados para  $d \leq 2$ . Para introduzir correlações de longo-alcance distribuímos as energias dos sítios de acordo com o traço de um movimento Browniano fracionário com densidade espectral  $S(k) = 1/k^\alpha$ , onde o parâmetro  $\alpha$  controla as correlações e se relaciona com o expoente de Hurst da forma  $\alpha = 2H + 1$ . Trabalhos recentes [17] indicam que existe um valor crítico  $\alpha_c$  e que para  $\alpha < \alpha_c$  todos os estados de um elétron são localizados, enquanto que se  $\alpha > \alpha_c$  ocorre uma transição metal-isolante em sistemas com este tipo de desordem. Este valor crítico tem uma dependência exponencial com a variância das energias  $\Delta\epsilon_i$ , quando a  $\Delta\epsilon_i = 1$  este valor crítico é  $\alpha_c = 2$ . Resolvendo numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo e calculando algumas quantidades como o desvio médio quadrático  $\sigma^2(t)$  e a função participação  $\xi(t)$ , encontramos três regimes atuantes na dinâmica inicial do pacote de onda localizado inicialmente, antes do pacote alcançar os limites da rede unidimensional [44]. Temos um regime difusivo para  $\alpha < 1$ , um regime superdifusivo para  $1 < \alpha < 2$ , e um regime balístico quando  $\alpha > 2$ . A inclusão de interações entre

os elétrons com os fônons da rede vem ganhando atenção na comunidade científica. Mostramos aqui alguns resultados que indicam que a competição entre a desordem diagonal e não-linearidade não-diagonal em redes unidimensionais, leva ao surgimento de estados localizados mesmo quando  $\alpha > \alpha_c$ . Isto sugere que correlações na diagonal do Hamiltoniano de Anderson podem produzir resultados interessantes se interações elétron-fônon forem acopladas aos termos não-diagonais do Hamiltoniano. No entanto, este tipo de modelagem ainda precisa de muita investigação.

# Referências

- [1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid state physics*. Saunders College, New York, 1976.
- [2] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, Canadian, 1971.
- [3] B. Kramer and A. MacKinnon. *Rep. Prog. Phys.*, **56**:1469, 1993.
- [4] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. G. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. *Phys. Rev.*, **42**:673, 1979.
- [5] P. W. Anderson. *Phys. Rev.*, **109**:1492, 1958.
- [6] I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul, and L. A. Pastur. *Introduction to the theory of disordered systems*. Wiley, New York, 1988.
- [7] R. Zallen. *The physics of amorphous solids*. Wiley, New York, 1983.
- [8] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick. *Rev. Mod. Phys.*, **66**:261, 1994.
- [9] P. A. Lee and P. V. Ramakrishnan. *Rev. Mod. Phys.*, **57**:287, 1985.
- [10] Rudolf A. Römer. *From localization to delocalization in disordered systems*. PhD thesis, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, Germany, August 1999.

- 
- [11] S. Bogdanovich, M. P. Sarachik, and R. N. Bhatt. *Phys. Rev. Lett*, **82**:137, 1999.
- [12] T. V. Ramakrishnan and P. A. Lee. *Rev. Mod. Phys.*, **57**:287, 1985.
- [13] S. Waffenschmidt, C. Pfeleiderer, and H. V. Löhneysen. *Phys. Rev. Lett.*, **83**:3005, 1999.
- [14] P. Carpena, P. Bernaola-Galán, P. Ch. Ivanov, and H. E. Stanley. *Nature*, **418**:955, 2002.
- [15] D. H. Dunlap, H. L. Wu, and P. Phillips. *Phys. Rev. Lett*, **65**:88, 1990.
- [16] F. C. Lavarda, M. C. dos Santos, D. S. Galv ao, and B. Laks. *Phys. Rev. Lett*, **73**:1267, 1994.
- [17] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra. *Phys. Rev. Lett*, **81**:3735, 1998.
- [18] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra. *Phys. Rev. Lett*, **84**:199, 2000.
- [19] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra. *Physica. A*, **266**:465, 1999.
- [20] H. L. Wu and P. Phillips. *Phys. Rev. Lett*, **66**:1366, 1991.
- [21] D. J. Thouless. *Physics Report*, **13**:93, 1974.
- [22] A. Bovier. *J. Phys. A*, **25**:1021, 1992.
- [23] J. C. Flores. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **1**:8471, 1989.
- [24] R. Russ, J. W. Kantelhardt, A. bunde, S. Havlin, and I. Webman. *Physica A*, **266**:492, 1999.
- [25] P. W. Phillips and H. L. Wu. *Science*, **252**:1805, 1991.
- [26] A. Sánchez and F. Domínguez-Adame. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**:3725, 1994.

- 
- [27] A. Sánchez, E. Maciá, and F. Domínguez-Adame. *Phys. Rev. B*, **49**:147, 1994.
- [28] F. M. Izrailev and A. A. Krokhin. *Phys. Rev. Lett.*, **82**:4062, 1999.
- [29] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, and S. E. Ulloa. *Phys. Rev. B*, **63**:41102, 2001.
- [30] G. P. Zhang and S. J. Xiong. *Eur. Phys. J. B*, **29**:491, 2002.
- [31] C. K. Peng *et al.* *Nature*.
- [32] H. E. Stanley. *Fractals*, **1**:283, 1993.
- [33] B. B. Mandelbrot and J. W. van Ness. *SIAM Rev.*, **10**:422, 1968.
- [34] B. B. Mandelbrot. *The fractal geometry of nature*. Freeman, New York, 1983.
- [35] J. Feder. *Fractals*. Plenum Press, New York, 1988.
- [36] G. G. Fox. *Pure Appl. Geophys.*, **131**:211, 1989.
- [37] N. P. Greis and H. S. Greenside. *Phys. Rev. A*, **44**:2324, 1991.
- [38] Heinz-Otto Peitgen and Dietmar Saupe, editors. *The science of fractal images*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [39] T. Higuchi. *Physica. D*, **31**:277, 1988.
- [40] T. Higuchi. *Physica. D*, **46**:254, 1988.
- [41] A. R. Osborne. *Physica. D*, **46**:254, 1988.
- [42] A. Tsonis. *Chaos: from theory to applications*. Plenum Press, New York, 1992.
- [43] J. C. Cressoni and M. L. Lyra. *Phys. Rev. B*, **53**:5067, 1996.
- [44] B. Santos, L. P. Viana, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura. *Solid State Communications.*, **49**:147, 2006.

- 
- [45] L. Fleishman and D. C. Licciardello. *J. Phys. C*, **10**:L125, 1977.
- [46] G. Theodorou and M. Cohen. *Phys. Rev. B*, **13**:4597, 1976.
- [47] S. N. Evangelou and D. E. Katsanos. *Phys. Lett. A*, **164**:456, 1992.
- [48] J. C. Flores and M. Hilke. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **26**:L1255, 1993.
- [49] J. Heinrichs. *Phys. Rev. B*, **51**:5699, 1995.
- [50] M. Hilke. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**:4773, 1994.
- [51] Z. Pan and C. Gong S. Xiong. *Phys. Rev. E*, **56**:4744, 1997.
- [52] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. *Phys. Rev. B*, **22**:2099, 1980.