

Propriedades de transporte em moléculas de DNA

ROSA CAROLINA PINTO CARVALHO

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

Propriedades de transporte em Moléculas de DNA

ROSA CAROLINA PINTO CARVALHO

Trabalho apresentado no Instituto de Física
da Universidade Federal de Alagoas como parte dos
créditos para a obtenção do título de Bacharela em
Física.

Orientador:

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Maceió - Brasil

Janeiro - 2009

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente a todos os amigos de verdade que fiz no Instituto de Física da UFAL.

Em ordem cronológica, agradeço ao Francisco de Assis (Chiquinho) que já era meu amigo antes de entrar aqui e me acompanhou todo este tempo formando comigo "A Lina e O Chico", sem definições. Agradeço também ao Thiaguinho que foi a pessoa mais importante pra mim no último ano de curso, me ajudando em vários aspectos. O meu obrigada ao Edmilson Mirçuca por sempre ser estranho, mas prestativo, tornando-se uma espécie única e muito querida. Meu obrigada ao Rafael Duarte (Rafinha) por ser amigo e por ter me apresentado o Douglas Adams (essencial na minha vida). Também tem a Patrícia e Lidiane, minhas companheiras das madrugadas regadas a livros, chocolates e cafés. Obrigada aos meninos Anderson Pivetão e José Henrique pelas gargalhadas, Filipe pelos abraços e Fred pelos chocolates.

Obrigada aos professores. SEMPRE! Em especial, ao Professor Marcelo, que consegue explicar em dois minutos sentado numa mesa de bar o que outra pessoa não consegue explicar em duas horas; Tereza; Kléber; Héber e, óbvio, obrigada ao Professor Francisco, por todos os conselhos, paciência, e por ser a pessoa que mais me ajudou a concluir este Trabalho de Conclusão de Curso.

Obrigada então aos meus pais por sempre me darem todo o apoio que eu preciso e me aceitarem do jeito que eu sou. Eu poderia até não ter amigos (o que não é o caso), mas jamais me sentiria só. Neste contexto família, agradeço também ao meu irmão Gilberto; à Dot e à Phoebe, que sempre estavam literalmente do meu lado quando eu estudava e ao Chuchu (Italo Oliveira), por ser importante o suficiente pra entrar na categoria família. Por fim, agradeço a Deus por ser mãe e ter me feito pagar todos os pecados enquanto eu cursava física.

Resumo

No presente trabalho é estudado um formalismo analítico/numérico para resolver a equação de schrödinger dependente do tempo para um elétron em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade. O modelo de Anderson foi utilizado em sistemas físicos de duas cadeias acopladas com diferentes energias de sítio. Estas cadeias duplas se assemelham bastante às moléculas de DNA e vêm despertando o interesse acadêmico nas últimas décadas. Aplicando o formalismo de resolução da equação de schrödinger dependente do tempo nestas cadeias duplas mostramos fortes indícios que sugerem uma maior propagação eletrônica devido à presença de correlações cruzadas na desordem.

Sumário

Folha de rosto	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Sumário	iv
1 Introdução	1
1.1 Estrutura da molécula de DNA	2
1.2 Fatores que interferem o estudo da condutância do DNA	5
1.3 Estrutura cristalina	7
1.3.1 Defeitos em cristais	8
1.4 Transição de Anderson	10
1.5 Modelo de Anderson	11
2 Dinâmica eletrônica em sistemas amorfos	13
2.1 Formalismo Matemático	13
2.2 Acoplamento entre Duas Cadeias Lineares	17
2.2.1 Propriedades de transporte eletrônico : desvio médio quadrático . .	19
3 Aplicações	20
3.1 A influência da correlação na distribuição espacial do pacote de onda . . .	21
3.1.1 Resultados caso 1	22
3.1.2 Resultados caso 2	23
4 Conclusão	28
Referências	29

Sumário

Capítulo 1

Introdução

O presente trabalho constitui-se de uma discussão sobre o transporte de elétrons em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade, em especial, no ácido desoxirribonucléico, o DNA. O objetivo principal dessa discussão é estudar a mudança no comportamento da função de onda de um elétron quando um sistema possui correlação e quando o mesmo não possui.

Funções de onda estendidas representam maior deslocamento de elétrons no meio, fazendo com que o sistema possua características metálicas. Em cristais, substâncias puras com grande simetria translacional e correlação entre suas moléculas, os elétrons se movem livremente como se não houvessem barreiras e, por esta razão, os cristais são bons condutores.

Defeitos nos cristais diminuem a correlação entre as moléculas e quebram a simetria translacional interferindo no movimento dos elétrons fazendo com que o trânsito pelo material se torne mais difícil.

Sistemas desordenados são constituídos de diferentes tipos de moléculas e sem nenhuma correlação entre elas, desta forma, o transporte eletrônico é ainda mais difícil, fazendo com que os estados eletrônicos se tornem localizados. Nesta configuração, o sistema é isolante.

Já se sabe que o DNA é composto por nucleotídeos e que existe uma certa correlação entre eles, mas suas propriedades eletrônicas ainda são um desafio pra a ciência atual. Há trabalhos nos quais o DNA aparece como isolante em temperatura ambiente [1, 2, 3, 4, 5], outros em que pequenas moléculas de DNA são semicondutoras com uma grande largura de banda [6, 7], outros em que o DNA possui comportamento Ôhmico [8, 2], e ainda um

único trabalho em que o DNA é supercondutor induzido em baixas temperaturas [9].

O crescente interesse da ciência nas propriedades eletrônicas do DNA é devido a inúmeras razões. Uma forma condutora de DNA causaria um grande impacto no desenvolvimento da tecnologia. Há também um crescente interesse da biologia em relação às propriedades condutoras do DNA, pois isto pode facilitar a compreensão de alguns processos ocorridos no interior de células, como o processo de reparação do DNA danificado devido à oxidação.

Para entender melhor as propriedades eletrônicas no DNA, faz-se necessário primeiro conhecer sua estrutura.

1.1 Estrutura da molécula de DNA

O DNA carrega as informações genéticas em todos os seres vivos estando, portanto, presente em todas as espécies com vida.

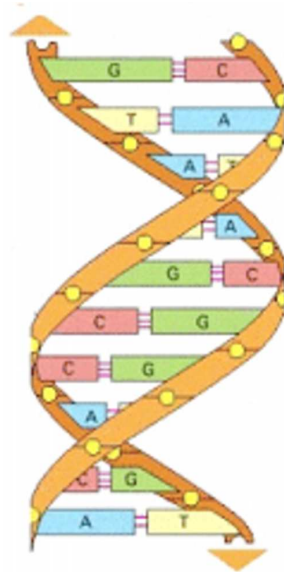


Figura 1.1: Estrutura helicoidal da molécula de DNA [10].

A molécula de DNA é composta por duas fitas dispostas helicoidalmente formando uma estrutura de dupla hélice, como ilustrado na figura 1.1. Esta estrutura é aceita atualmente e foi proposta por James Watson (biólogo), Francis Crick (físico), Maurice

Wilkins (fisiologista) e Rosalind Franklin (biofísica). Este modelo foi publicado na revista Nature em 1953 e só ganhou credibilidade com o passar do tempo quando foi mostrado que ele se adequava às evidências. As descobertas envolvendo a estrutura molecular dos ácidos nucléicos e sua importância para a transmissão da informação nos seres vivos rendeu a três dos quatro cientistas (Rosalind Franklin já havia morrido) o prêmio Nobel de medicina de 1962.

O modelo formulado por esses cientistas prevê que cada fita do DNA é composta por moléculas de fosfato intercaladas com moléculas de açúcar (pentose) nas quais estão agregadas bases nitrogenadas (figura 1.2). Tais bases podem ser adenina (A), timina (T), citosina (C) ou guanina (G).

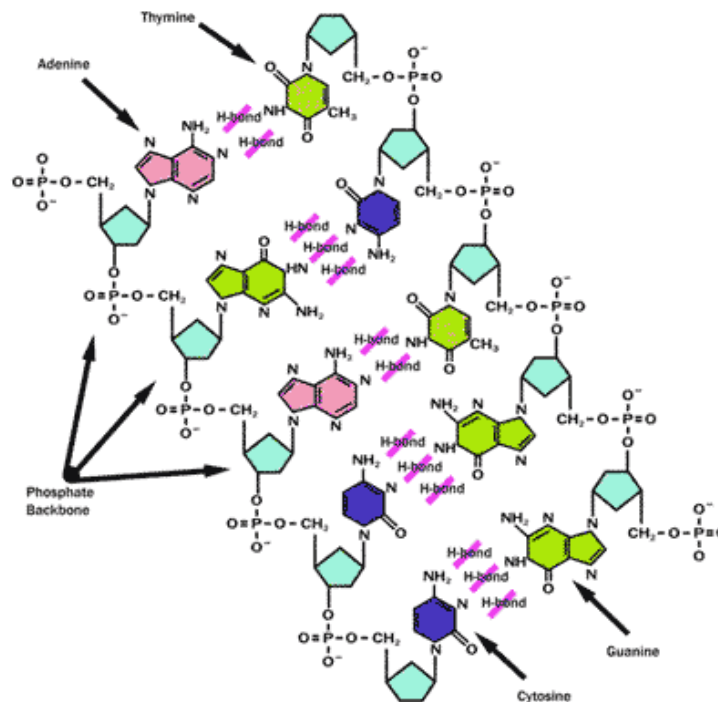


Figura 1.2: Estrutura química da molécula de DNA mostrando as moléculas de fosfato intercaladas com pentoses [11].

As duas fitas do DNA se unem por ligações do tipo pontes de hidrogênio entre estas bases. Devido às configurações químicas, só é possível fazer a união de uma timina com uma adenina (duas ligações pontes de hidrogênio) e de uma citosina com uma guanina (três ligações pontes de hidrogênio). A figura 1.3 mostra estas ligações.

A distância entre as duas fitas do DNA são de, em média $2nm$ enquanto a distância

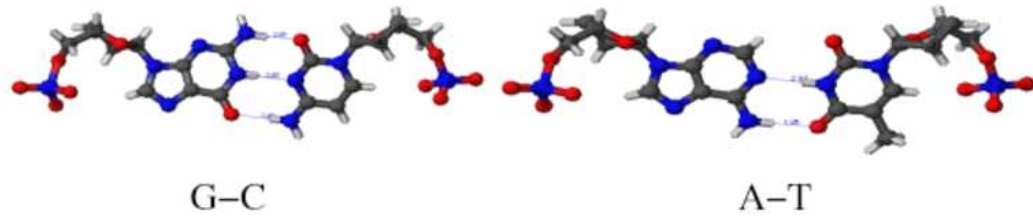


Figura 1.3: Os dois possíveis pares de bases nitrogenadas. São três ligações do tipo pontes de hidrogênio para o par guanina e citosina e duas para o par timina e adenina [12].

entre dois aminoácidos são de $3,4\text{\AA}$.

Ao conjunto formado por uma base nitrogenada, um açúcar e um fosfato damos o nome de nucleotídeo. Três nucleotídeos, por sua vez, formam um aminoácido.

Para formar a seqüência de uma fita na molécula de DNA, o grupo hidroxila do carbono-3 da pentose de um nucleotídeo se une ao grupo fosfato ligado ao carbono-5 da pentose de outro nucleotídeo por meio de uma ligação fosfodiéster (pontes de fosfato). Esta formação dá ao DNA uma direção determinada pois em uma extremidade temos a hidroxila do carbono-5 da primeira pentose livre e, na outra extremidade, temos livre a hidroxila do carbono-3 da última pentose, conforme vemos na figura 1.4. Devido ao fato do DNA possuir fitas complementares, sua síntese é feita de tal forma que uma de suas fitas possui a direção exata de sua síntese, seguindo a ordem grupo fosfato do carbono-5 à hidroxila do carbono-3; enquanto a outra fita possui direção invertida, indo da hidroxila do carbono-3 ao grupo fosfato ligado ao carbono-5.

O DNA humano se encontra no núcleo das células e possui 6mm de comprimento com, em média, $2 \cdot 10^8$ nucleotídeos e pode ser empacotado num volume de $500\mu\text{m}^3$ [13]. Essa pequena molécula de 6mm de comprimento é capaz de carregar todas as características de um ser humano. Para se ter noção da quantidade de informação que o DNA consegue carregar, podemos fazer uma comparação onde tomamos um conjunto de três nucleotídeos e o comparamos a um byte, então a densidade linear de informação contida numa molécula de DNA seria igual a $1\text{kb}\mu\text{m}^{-1}$ e a densidade volumétrica de informação seria de $1,2\text{Mb}\mu\text{m}^3$ [14]!

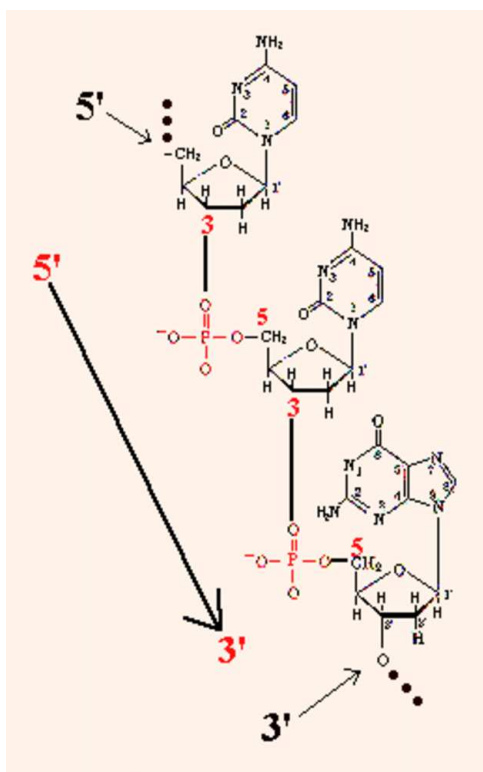


Figura 1.4: Ligações específicas para formar uma fita do DNA [15].

1.2 Fatores que interferem o estudo da condutância do DNA

O estudo das propriedades eletrônicas do DNA começou quando, na década de noventa, foram observadas evidências de transferência de cargas independentes da distância quando se intercalava moléculas de DNA a metais de transição [16]. Este fato chamou a atenção da comunidade científica, que percebeu que isto poderia ter implicações na biologia e na biotecnologia.

O comportamento condutor do DNA já era esperado há décadas pois, em 1962, Eley e Spivey sugeriram que a hibridização dos orbitais π paralela ao plano das ligações entre as bases poderia levar a um comportamento condutor. Há cristais aromáticos, similares ao DNA, que são metálicos. Os mais famosos são os sais de Bechgaard (figura 1.5). Mas, por outro lado, o DNA biológico não é um sistema periódico como os cristais. A maior

diferença de potencial de ionização entre duas bases isoladas é entre a guanina e a timina e o valor é próximo a $0,6eV$, o que excede o acoplamento eletrônico estimado entre o orbital molecular ocupado mais alto (HOMO - Highest Occupied Molecular Orbital) ou o orbital molecular ocupado mais baixo (LUMO - Lowest Unoccupied Molecular Orbital) dos pares de bases vizinhas. Isto nos faz esperar que os estados eletrônicos sejam localizados. Entretanto, vem à tona outro fator: foi descoberto que o DNA possui uma correlação de longo alcance [17].

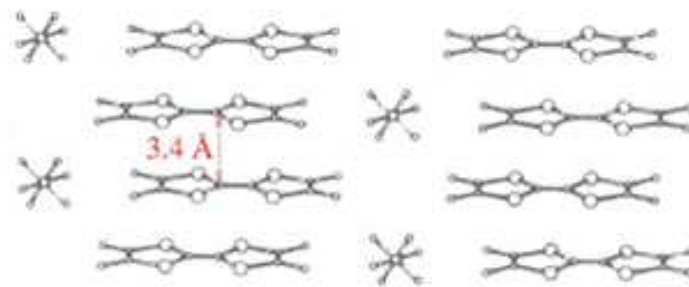


Figura 1.5: Sais de Bechgaard, $(TMTSF)_2PF_6$, um cristal aromático condutor [12].

Entre os fatores que impulsionam o estudo das propriedades eletrônicas no DNA estão suas ligações altamente específicas em cada fita e sua capacidade de se auto-organizar. Também já é possível, com a tecnologia atual, sintetizar uma molécula de DNA numa sequência qualquer desejada. Entretanto, há outros inúmeros fatores que dificultam esse estudo.

Ao estudar o comportamento eletrônico do DNA, é necessário considerar também o meio em que ele está imerso, pois a estrutura de dupla hélice do DNA se comporta de tal forma que as bases hidrofóbicas ficam no interior da molécula, sem contato com o meio; enquanto os íons fosfato, que estão em contato com o meio externo, atraem íons carregados positivamente (normalmente sódio ou magnésio). Estes íons, assim também como a água, exercem forças não negligíveis sobre os elétrons dos pares de bases [12], e, desta forma, contribuem para a importância na condutividade da molécula.

Esse último fator contribui muito para que as propriedades eletrônicas do DNA ainda sejam bastante controversas. Como já foi dito, o DNA aparece em diversos trabalhos científicos, sendo considerado de isolante a supercondutor induzido. Cada trabalho considera o DNA num meio diferente.

Complicando ainda mais o estudo do DNA como material eletrônico estão as vi-

brações moleculares. A distância entre duas bases é de $3,4\text{\AA}$, enquanto o deslocamento vibracional quadrático médio é estimado em $0,3$ a $0,4\text{\AA}$ [18], o que é 10% da constante da rede e uma ordem maior que os cristais em temperatura ambiente.

O DNA parece estar na iminência de se desmanchar. Esta propriedade é muito útil biologicamente pois facilita a replicação de suas fitas e o reparo de seus aminoácidos, mas ao mesmo tempo dificulta o seu uso tecnológico, já que um material estável seria mais fácil de trabalhar.

1.3 Estrutura cristalina

Para entender a complexidade do estudo de sistemas desordenados, em especial o DNA, vamos primeiramente introduzir conceitos referentes a sistemas ordenados e alguns modelos usados para descrever o comportamento de elétrons nestes sistemas.

Como já foi dito, os cristais são bons exemplos de sistemas ordenados. Suas estruturas são formadas por cópias da mesma estrutura física (átomos, moléculas ou íons) localizadas em pontos da rede de Bravais [19], ou seja em pontos em que a orientação e o arranjo parecem ser exatamente os mesmos. Chamamos esta propriedade de simetria translacional.

Redes periódicas, como a de cristais, possuem potencial periódico, ou seja:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}) \quad (1.1)$$

onde \vec{R} é um vetor típico da rede de Bravais.

A figura 1.6 mostra um potencial periódico em função da posição. As bolas são as posições de equilíbrio dos íons, a curva sólida é do potencial ao longo da linha de íons, a curva pontilhada representa o potencial entre os íons e a linha tracejada representa o potencial de cada íon isolado.

Potenciais periódicos são encontrados em materiais com ausência de impurezas e defeitos, como os cristais. A maioria dos modelos referentes aos sólidos trata justamente destes tipos de materiais. Um modelo bastante conhecido é o de Bloch que prevê resistência nula para materiais perfeitamente cristalinos.

As funções de onda de um elétron em um cristal perfeito são encontradas solucionando-se a equação de Schrödinger:

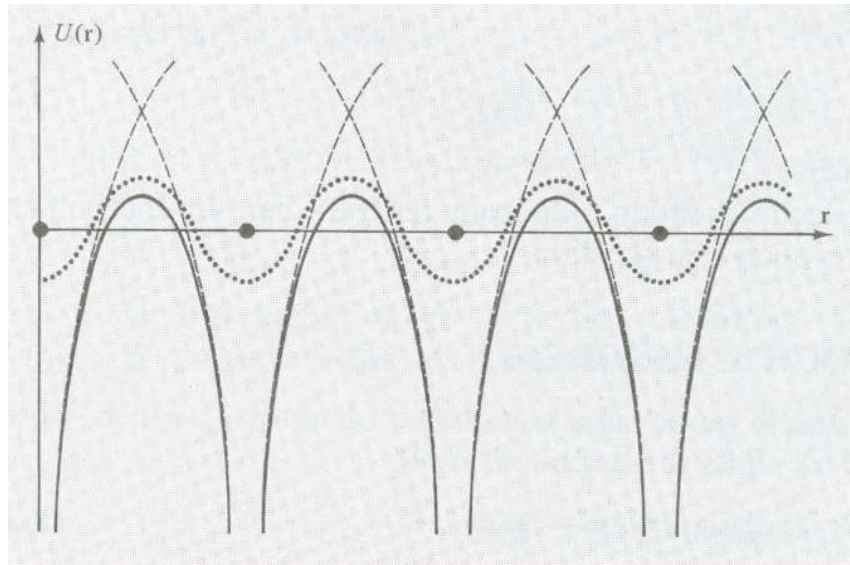


Figura 1.6: Forma do potencial cristalino esperada [19].

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = \epsilon\psi \quad (1.2)$$

onde $U(\vec{r})$ é o potencial periódico dado por (1.1) e \vec{R} é um vetor da rede de Bravais.

As soluções da equação 1.2, conhecidas como ondas de Bloch, são estendidas em todo o material caracterizando a ausência de resistência.

Para o caso do elétron livre, ou seja, quando não são consideradas as interações de um elétron com os íons da rede e com outros elétrons, temos $U(\vec{r}) = 0$.

1.3.1 Defeitos em cristais

Os modelos teóricos formulados tratam de cristais perfeitos, entretanto, os cristais encontrados na natureza e aqueles fabricados em laboratório sempre possuem defeitos. Defeitos ocorrem quando há uma região onde o arranjo microscópico de íons muda drasticamente. Os defeitos podem ser formados por vibrações térmicas ou por tensões e compressões sofridas pelo cristal e podem ser pontuais (uma dimensão), lineares (duas dimensões) ou planares (três dimensões). No local onde há defeito, o arranjo microscópico dos íons é drasticamente diferente do arranjo de um cristal perfeito. Os defeitos podem

aparecer nas mais diferentes formas. Os mais comuns são:

- Vacâncias: São defeitos pontuais caracterizados pela ausência de íons na rede cristalina. Este defeito é responsável pela condutividade elétrica de cristais iônicos e pode alterar suas propriedades óticas como a cor do cristal. Quanto maior a vibração, mais fácil fica a saída de um átomo da estrutura formando uma vacância.

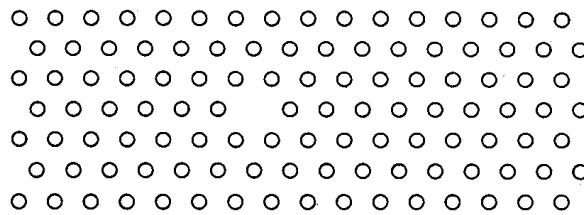


Figura 1.7: Uma porção de uma rede de Bravais monoatômica contendo uma vacância.

- Defeitos intersticiais: Ocorrem quando há um átomo extra na estrutura. Estes defeitos também alteram as propriedades elétricas e óticas do cristal.

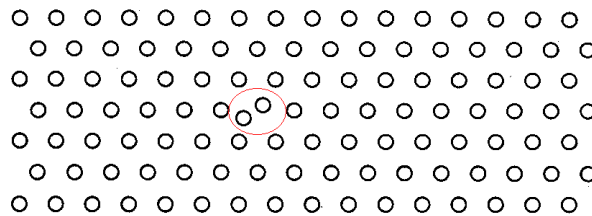


Figura 1.8: Uma porção de uma rede de Bravais monoatômica contendo um defeito intersticial.

- Impureza substitutiva: Quando um átomo diferente substitui diretamente um átomo que forma o cristal.
- Deslocações: Quando toda uma sequência de átomos se desloca, criando uma deformação ao seu redor. Este defeito explica a força dos cristais reais, pois quanto mais os cristais se aproximam da perfeição, mais fracos eles se tornam. É normalmente criado por tensões causadas por efeitos térmicos ou mecânicos. Este defeito só é perceptível nas regiões próximas a ele. Longe do defeito, a rede parece uma estrutura perfeita.

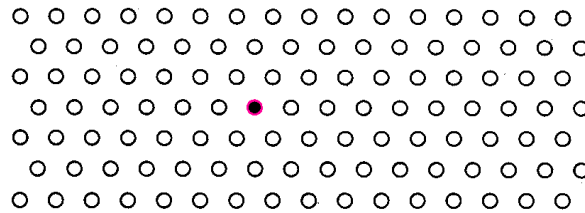


Figura 1.9: Uma porção de uma rede de Bravais monoatômica contendo uma impureza substitutiva.

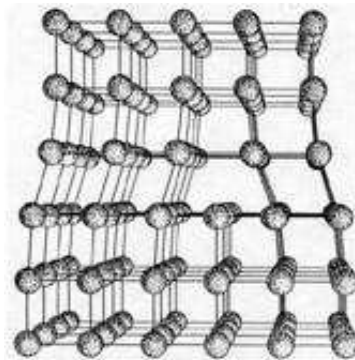


Figura 1.10: Exemplo de deslocação.

A energia para criar um defeito pontual é de poucos eV, enquanto a energia para criar uma deslocação é de aproximadamente 100 eV. Por esta razão, defeitos pontuais são os defeitos mais comumente encontrados. Defeitos planares necessitam de energias ainda maiores para existir sendo então mais raros.

Existem ainda outros tipos de defeitos em redes cristalinas que não são citados aqui.

Por mais puro que um cristal seja, ele sempre vai conter impurezas. Por isso, fez-se necessário a elaboração de novos modelos que considerassem cristais reais, um deles é o modelo de Anderson.

1.4 Transição de Anderson

Na década de 50, Philip Warren Anderson introduziu um modelo que estudava o movimento de elétrons sob a influência de um potencial aleatório. Este modelo despreza as interações Coulombianas entre os elétrons e considera apenas a interação dos elétrons

com os íons (átomos) da rede. Em sistemas tridimensionais Anderson mostrou que, quando o grau da desordem é pequeno, o sistema se assemelha a um cristal, tendo as funções de onda eletrônicas estendidas e um comportamento metálico. À medida que a desordem vai aumentando o sistema 3d apresenta uma transição metal-isolante. Quando a desordem é grande, os estados eletrônicos são exponencialmente localizados e o sistema tem comportamento isolante [21]. Desta forma, Anderson mostrou que os estados eletrônicos dependem fortemente da desordem do sistema [20].

O modelo introduzido por Anderson prevê que, independente do grau de desordem, sistemas com dimensão menor ou igual a 2 sempre possuem estados eletrônicos exponencialmente localizados. Por outro lado, nos últimos 15 anos vêm sendo feitos estudos do modelo de Anderson para uma dimensão (1d) contendo correlações de curto e longo alcance na distribuição da desordem. Foi mostrado que a correlações na distribuição de desordem contribui de forma significativa na condução eletrônica, pois estados estendidos ressonantes e fases metálicas foram encontradas.

A existência de fase metálica em sistemas unidimensionais impulsiona o estudo da desordem correlacionada em várias áreas de conhecimento, incluindo o estudo do transporte eletrônico em cadeias de DNA.

Para entender melhor como ocorre a transição metal-isolante, vamos considerar inicialmente o modelo de Bloch para um elétron livre ($U(\vec{r}) = 0$). Se introduzirmos uma barreira de potencial, como um átomo que não pertence à rede, por exemplo, a função de onda será parcialmente transmitida e parcialmente refletida devido à presença do potencial. Se introduzirmos uma nova barreira de potencial, a função de onda será novamente refletida e transmitida. Desta forma, entre as duas barreiras, haverá ondas refletidas e transmitidas que, dependendo da diferença entre suas fases, sofrem interferências destrutivas ou construtivas. Se introduzirmos então várias barreiras de potencial com potenciais aleatórios e posições aleatórias, a função de onda sofrerá várias reflexões e, com isso, sofrerá também várias interferências destrutivas o que resultará em sua localização exponencial, ou seja, as amplitudes da onda não são nulas em uma pequena parte da rede e são desprezíveis nas outras regiões, caracterizando a fase isolante. Em um meio sem barreiras potenciais, como os cristais perfeitos, temos a fase metálica a qual é caracterizada por estados estendidos, onde o elétron pode viajar livremente por toda a rede [21].

1.5 Modelo de Anderson

O modelo introduzido por Anderson em 1958 se torna importante aqui pois ele é aplicável para elétrons se movendo sob a influência de um potencial aleatório.

Usando a aproximação *tight-binding*, o Hamiltoniano de Anderson pode ser escrito como:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} T_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (1.3)$$

O estado $|i\rangle$ representa o sítio i , enquanto ϵ_i representa a energia deste sítio. Para que o elétron transite de um sítio i para um outro sítio j , é necessária uma energia T_{ij} conhecida por amplitude de *hopping*.

Aqui, a desordem pode ser aplicada variando os valores das energias dos sítios $\epsilon_i |i\rangle$. Usando este modelo, Anderson mostrou que a desordem levava a uma localização da função de onda eletrônica.

Descobertas feitas por Anderson foram de grande importância para o entendimento das propriedades de condução em materiais. Anderson observou que, em um sólido com temperatura nula; desprezando interações mútuas ou ligações com outros graus de liberdade, como fônons; uma partícula exponencialmente localizada não participa do processo de condução uma vez que só há probabilidade dela de encontrar em uma região finita do sólido. Já uma partícula com estado estendido pode se locomover por toda a rede, pois existe uma probabilidade finita dela estar em qualquer sítio. Assim, no limite de $T = 0$, a condutividade é nula e o sistema é isolante se só houverem estados localizados e o sistema é condutor com condutividade finita se os estados forem estendidos [22].

Apesar de simplificado, o modelo de Anderson é usado até os dias atuais, sendo bastante eficiente para estudar os efeitos da desordem no transporte eletrônico. Assim, após a apresentação do modelo de Anderson, inúmeros trabalhos foram feitos mudando o grau de desordem dos sistemas. Os resultados obtidos comprovaram que correlações de curto e longo alcance interferem na condutividade do sistema.

Neste trabalho de conclusão de curso, será mostrado como a função de onda se comporta quando o DNA possui uma sequência de nucleotídeos completamente aleatória e quando correlações são postas entre estes nucleotídeos.

Capítulo 2

Dinâmica eletrônica em sistemas amorfos

2.1 Formalismo Matemático

Como vimos, o Hamiltoniano de Anderson na aproximação para um elétron pode ser escrito da seguinte forma:

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

Aqui, ϵ_i é a energia do elétron no sítio i e $T_{i,j}$ é a energia de *hopping* necessária para um elétron se mover do sítio i para outro sítio j .

Outra maneira de escrever a equação acima é:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_i \sum_{\delta} [T_{i,i-\delta} |i\rangle\langle i-\delta| + T_{i,i+\delta} |i\rangle\langle i+\delta|] \quad (2.2)$$

Onde δ os sítios vizinhos ao sítio i .

Desta forma, a equação de Schrödinger dependente do tempo é:

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = H|\Psi\rangle \quad (2.3)$$

Que pode ser resolvida encontrando-se:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\Psi_0(t = t_0)\rangle \quad (2.4)$$

onde:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i C_i^{(t)} |i\rangle \quad (2.5)$$

Aqui, $C_i^{(t)}$ é a amplitude de probabilidade de o elétron estar na posição i no tempo t . Logo, a função de onda no instante $t = 0$ é dada por:

$$|\Psi(t = 0)\rangle = \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle \quad (2.6)$$

Desta maneira, podemos escrever a equação 2.3 como:

$$\sum_i C_i^{(dt)} |i\rangle = e^{-\frac{iHdt}{\hbar}} \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle \quad (2.7)$$

Expandindo a exponencial acima em série de Taylor, temos que:

$$e^{-\frac{iHdt}{\hbar}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n \quad (2.8)$$

Isto nos permite escrever a equação 2.7 como:

$$\sum_i C_i^{(dt)} |i\rangle = \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_i \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n C_i^{(0)} |i\rangle \quad (2.9)$$

Agora, tomando $n = 1$ no somatório acima, encontramos:

$$\begin{aligned} -\frac{iHdt}{\hbar} \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle &= -\frac{it}{\hbar} \sum_i C_i^{(0)} \left[\sum_{i'} \epsilon_{i'} |i'\rangle \langle i'| + \right. \\ &\left. \sum_{i'} \sum_{\delta} T_{i,i-\delta} |i'\rangle \langle i' - \delta| + \sum_{i'} \sum_{\delta} T_{i,i+\delta} |i'\rangle \langle i' + \delta| \right] |i\rangle \end{aligned} \quad (2.10)$$

Entretanto:

$$\langle i' | i \rangle = \delta_{i',i} \quad (2.11)$$

$$\langle i' + \delta | i \rangle = \delta_{i'+\delta,i} \quad (2.12)$$

Assim, tomando apenas os primeiros vizinhos, o somatório em δ varia de -1 até 1 e a amplitude de hopping assume um único valor T e é possível escrever:

$$-\frac{iHdt}{\hbar} \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = -\frac{it}{\hbar} \left[\sum_i C_i^{(0)} \epsilon_i |i\rangle + hl \sum_{i'} \sum_{\delta=-1}^1 C_{i'+\delta}^{(0)} |i'\rangle \right] \quad (2.13)$$

ou

$$-\frac{iHdt}{\hbar} \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = -\frac{it}{\hbar} \sum_i \left[C_i^{(0)} \epsilon_i + hl \sum_{\delta=-1}^1 C_{i+\delta}^{(0)} \right] |i\rangle \quad (2.14)$$

Substituindo a expressão acima na equação 2.9, temos, para $n = 1$:

$$\sum_i C_i^{(dt)} |i\rangle = \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle - \frac{idt}{\hbar} \sum_i \left[C_i^{(0)} \epsilon_i + hl \sum_{\delta=-1}^1 C_{i+\delta}^{(0)} \right] |i\rangle \quad (2.15)$$

Assim, é possível concluir que, para $n = 1$:

$$C_i^{(dt)} = C_i^{(0)} - \frac{idt}{\hbar} \left[C_i^{(0)} \epsilon_i + hl \sum_{\delta=-1}^1 C_{i+\delta,c}^{(0)} \right] \quad (2.16)$$

Tomando agora $n = 2$ no somatório da equação 2.8, temos:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^2 \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle \quad (2.17)$$

Utilizando o resultado para $n = 1$, podemos escrever que:

$$\left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \sum_i C_i^{(1)} |i\rangle \quad (2.18)$$

onde:

$$C_i^{(1)} = -\frac{idt}{\hbar} \left[C_i^{(0)} \epsilon_i + hl \sum_{\delta=-1}^1 C_{i+\delta}^{(0)} \right] \quad (2.19)$$

Assim, a equação 2.16 pode ser escrita como:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^2 \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \sum_i C_i^{(1)} |i\rangle = \sum_i C_i^{(2)} |i\rangle \quad (2.20)$$

E então, podemos assumir a igualdade:

$$C_i^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) C_i^{(1)} \quad (2.21)$$

De forma análoga, podemos tomar agora o terceiro termo do somatório em n da equação 2.8 e encontramos:

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^3 \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^2 \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle \quad (2.22)$$

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^3 \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^2 \sum_i C_i^{(1)} |i\rangle \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^3 \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \frac{1}{3} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \sum_i C_i^{(2)} |i\rangle \quad (2.24)$$

Assim, podemos escrever:

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^3 \sum_i C_i^{(0)} |i\rangle = \sum_i C_i^{(3)} |i\rangle \quad (2.25)$$

Onde foi considerado:

$$\sum_i C_i^{(3)} |i\rangle = \frac{1}{3} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) \sum_i C_i^{(2)} |i\rangle \quad (2.26)$$

De acordo com esta última igualdade e as igualdades anteriores para outros valores de n é possível generalizar o somatório para n termos da seguinte forma:

$$C_i^{(n)} = \frac{1}{n} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) C_i^{(n-1)} \quad (2.27)$$

Desta maneira, é possível estudar a evolução temporal do elétron no meio desejado.

2.2 Acoplamento entre Duas Cadeias Lineares

Neste ponto, vamos aplicar o formalismo apresentado na seção anterior para o caso de duas cadeias lineares acopladas. A motivação para este trabalho é, mais especificamente, para o DNA. Tomamos a molécula de DNA como duas fitas com uma sequência aleatória de bases nitrogenadas. Cada fita será simplificada como sendo uma linha e representada pela letra l . Os sítios de cada fita serão colunas e serão representados pela letra c . l só poderá assumir dois valores: 1 ou 2; enquanto c assumirá o valor N . Desta maneira, a molécula de DNA pode ser representada como uma matriz de ordem $(2, N)$.

Para o caso descrito, o Hamiltoniano de Anderson considerando apenas os primeiros vizinhos será dado por:

$$H = \sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N \epsilon_{l,c} |l, c\rangle \langle l, c| + \sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N \sum_{\delta=-1}^1 T |l, c\rangle \langle l, c+\delta| + \sum_{c=1}^N ht |1, c\rangle \langle 2, c+\delta| + \sum_{c=1}^N ht |2, c\rangle \langle 1, c+\delta| \quad (2.28)$$

Aqui, $\epsilon_{l,c}$ é a energia do sítio l, c e existem dois valores da amplitude de *hopping*: ht e hl . hl é a amplitude de *hopping* de um sítio para outro na mesma linha ou *hopping* longitudinal; ht é a amplitude de *hopping* de uma linha para a outra, ou *hopping* transversal.

A equação de Schrödinger dependente do tempo é, então:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{l,c}}{\partial t} = \epsilon_{l,c} \psi_{l,c} + \sum_{\delta=-1}^1 hl \psi_{l,c+\delta} + ht \psi_{1,c} + ht \psi_{2,c} \quad (2.29)$$

Conforme foi mostrado, a equação de Schrödinger dependente do tempo é:

$$|\Psi(dt)\rangle = e^{-\frac{iHdt}{\hbar}} |\Psi_0(t=0)\rangle \quad (2.30)$$

ou também:

$$|\Psi(dt)\rangle = \sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N C_{l,c}^{(dt)} |l, c\rangle \quad (2.31)$$

Onde $C_{l,c}^{(dt)}$ é a amplitude de probabilidade de o elétron estar na posição l, c após um tempo dt .

Da mesma forma que foi mostrado anteriormente, a função de onda no instante $t = 0$ é:

$$|\Psi(t = 0)\rangle = \sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N C_{l,c}^{(0)} |l, c\rangle \quad (2.32)$$

Logo, a equação 2.30 pode ser escrita como:

$$\sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N C_{l,c}^{(dt)} |l, c\rangle = e^{-\frac{iHdt}{\hbar}} \sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N C_{l,c}^{(0)} |l, c\rangle \quad (2.33)$$

Usando cálculos semelhantes aos mostrados anteriormente, podemos expandir em séries de potência e encontrar a seguinte relação de recorrência:

$$C_{l,c}^{(n)} = \frac{1}{n} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right) C_{l,c}^{(n-1)} \quad (2.34)$$

Desta maneira, é possível estudar, por meio de matrizes de transferência, a evolução temporal do elétron no meio desejado.

Aplicando o Hamiltoniano, em especial para o caso de uma molécula com duas cadeias lineares como a do DNA, a relação mostrada acima se apresenta das seguintes formas:

$$C_{1,c}^{(n)} = \frac{1}{n} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) C_{1,c}^{(n-1)} \epsilon_{1,c} + hl \sum_{\delta=-1}^1 C_{1,c+\delta}^{(n-1)} + ht C_{2,c}^{(n-1)} \quad (2.35)$$

$$C_{2,c}^{(n)} = \frac{1}{n} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) C_{2,c}^{(n-1)} \epsilon_{2,c} + hl \sum_{\delta=-1}^1 C_{2,c+\delta}^{(n-1)} + ht C_{1,c}^{(n-1)} \quad (2.36)$$

E as evoluções temporais são dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned} C_{1,c}^{(dt)} &= C_{1,c}^{(0)} + \frac{1}{1} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) C_{1,c}^{(1)} + \frac{1}{2} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) C_{1,c}^{(2)} \\ &\quad + \frac{1}{3} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) C_{1,c}^{(3)} + \dots + \frac{1}{n} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) C_{1,c}^{(n)} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned}
C_{2,c}^{(dt)} = & C_{2,c}^{(0)} + \frac{1}{1} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) (C_{2,c}^{(1)}) + \frac{1}{2} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) (C_{2,c}^{(2)}) \\
& + \frac{1}{3} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) (C_{2,c}^{(3)}) + \dots + \frac{1}{n} \left(\frac{-idt}{\hbar} \right) (C_{2,c}^{(n)})
\end{aligned} \tag{2.38}$$

2.2.1 Propriedades de transporte eletrônico : desvio médio quadrático

A partir da evolução temporal da função de onda, podemos calcular o desvio médio quadrático $\sigma(t)$. Esta grandeza nos permite medir o alargamento do pacote eletrônico e está diretamente relacionado à condutividade. O desvio médio quadrático é dado por:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{c=1}^N \sum_{l=1}^2 (c - c_0)^2 (|\psi_{l,c}(t)\rangle)^2}, \tag{2.39}$$

Onde:

$$c_0 = \sum_{l=1}^2 \sum_{c=1}^N c (|\psi_{l,c}(t)\rangle)^2 \tag{2.40}$$

é a posição média do elétron na cadeia dupla.

Um valor pequeno de σ caracteriza um estado localizado, pois a função de onda fica confinada numa região limitada da rede. Se σ cresce, a função de onda se difunde na rede. Quando o material se torna um condutor perfeito, os estados são estendidos e σ exibe uma dinâmica balística, ou seja, $\sigma \propto t$ [23].

Com base no conhecimento apresentado, foram desenvolvidos resultados mostrando o comportamento do desvio quadrático médio no tempo quando alguns parâmetros, como correlação e amplitude de *hopping*, foram modificados. Os resultados são apresentados no capítulo a seguir.

Capítulo 3

Aplicações

Vamos aplicar o formalismo analítico/numérico apresentado no capítulo 2 em sistemas físicos que vêm despertando o interesse acadêmico nas últimas décadas. Particularmente, vamos considerar um modelo constituído de um elétron se movendo em duas cadeias acopladas. A energia de ligação do elétron em cada sítio ou átomo deste modelo, também chamada de energia *on site*, será considerada aleatória. Vamos incluir correlações transversais entre as energias *on site* das duas cadeias, ou seja, a função $f = \langle \epsilon_{1,c} \epsilon_{2,c} \rangle$ que representa a correlação entre uma dada energia *on site* da primeira cadeia ($\epsilon_{1,c}$) e a energia *on site* na segunda cadeia ($\epsilon_{2,c}$) é não nula. A estrutura do DNA é um típico exemplo de sistema real que apresenta este tipo de correlações cruzadas. Considerando uma geometria de cadeia dupla para representar o DNA, temos um emparelhamento transversal entre os nucleotídeos G-C, A-T, C-G, T-A. Recentes trabalhos apontam este tipo de correlação presente no DNA como sendo o ingrediente chave para a existência de estados eletrônicos metálicos [24]. Os efeitos das correlações cruzadas sobre as propriedades de transporte no DNA têm extenso debate na literatura [25]. Neste capítulo, vamos aplicar nossa metodologia dentro deste tema polêmico. Pretendemos investigar as propriedades de transporte em geometrias semelhantes à geometria de cadeia dupla do DNA que contenham correlações cruzadas na distribuição de desordem. Os resultados mostrados neste capítulo foram obtidos por meio de programação em linguagem FORTRAN. Foi aplicado o formalismo descrito nas equações 2.37 e 2.38 até a ordem $n = 20$ utilizando uma discretização temporal de $dt = 0.05$. A conservação da norma da função foi aplicada a cada intervalo de tempo.

3.1 A influência da correlação na distribuição espacial do pacote de onda

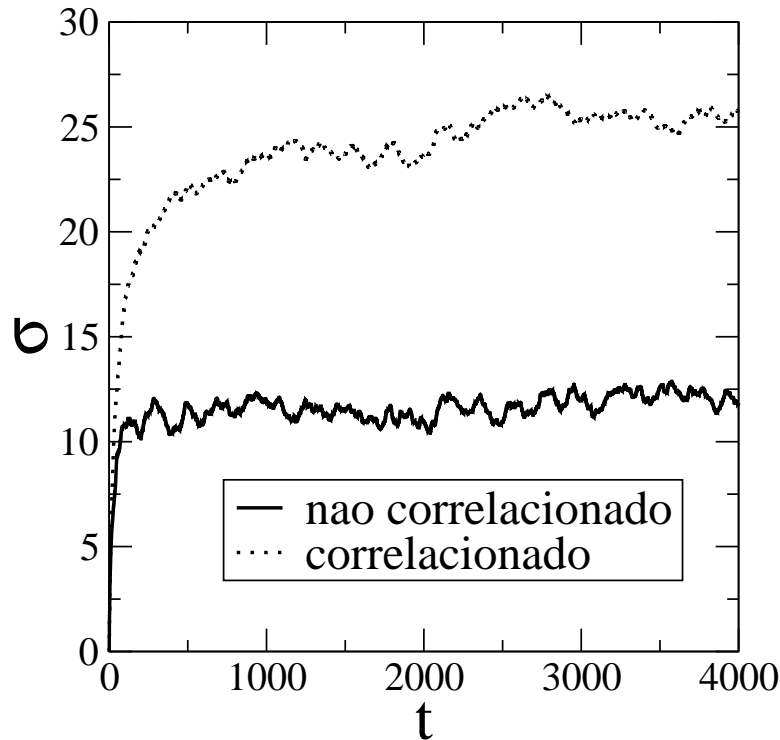


Figura 3.1: Gráfico do desvio médio quadrático em função do tempo considerando uma sequência correlacionada e outra não correlacionada. A geometria de cadeia dupla com correlações cruzadas (linha pontilhada) apresenta um desvio médio quadrático maior, indicando que, de fato, as correlações cruzadas promovem uma diminuição da localização dos estados eletrônicos.

Para estudar o efeito das correlações cruzadas na distribuição espacial da função de onda, inicialmente construímos uma cadeia dupla contendo as típicas correlações cruzadas do DNA: uma timina se ligando necessariamente a uma adenina e uma guanina se ligando apenas a uma citosina. Esta cadeia foi formada por N nucleotídeos dispostos aleatoriamente. As probabilidades de ocorrer uma timina(T), adenina(A), citosina(C) ou guanina(G) num determinado sítio foram as mesmas. Uma segunda cadeia dupla também foi construída. Nela os nucleotídeos foram dispostos aleatoriamente em ambas as cadeias.

Consideramos então dois casos distintos:

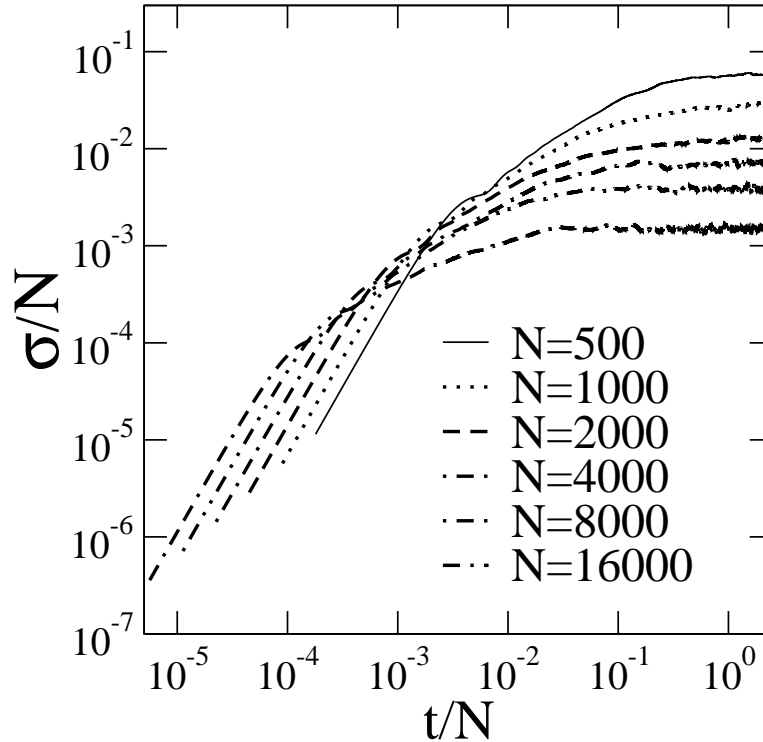


Figura 3.2: Desvio médio quadrático reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N calculado em um modelo de cadeia dupla com desordem correlacionada. Crescendo o número de nucleotídeos, observamos que σ/N tende a zero indicando estados localizados no limite termodinâmico.

Caso 1: As energias *on site* dos nucleotídeos, em unidades de eV são dados por $EG = 7.75$, $EC = 8.87$, $ET = 9.14$, $EA = 8.24$ e $ht = hl = 1$. Estes parâmetros são os mais aceitos cálculos *ab initio* para as energias dos nucleotídeos do DNA[14, 26, 27]

Caso 2: Numa segunda etapa vamos considerar um DNA artificial com energias *on site* dadas por $EG = 0.5$, $EC = -0.5$, $ET = 0.3$ e $EA = -0.3$ todos em eV. Este modelo foi exatamente o modelo considerado por R.A. Caetano e P. Schulz na referência [24].

3.1.1 Resultados caso 1

Na figura 3.1 apresentamos o desvio médio quadrático em função do tempo calculado em modelos com N nucleotídeos. Consideramos aqui uma discretização temporal de $dt = 0.05$. A norma da função de onda foi calculada a cada passo de integração para garantir a precisão numérica desejada ($\sum_{c,l} |\psi_{c,l}|^2 - 1 < 10^{-10}$). Observamos no gráfico que a cadeia

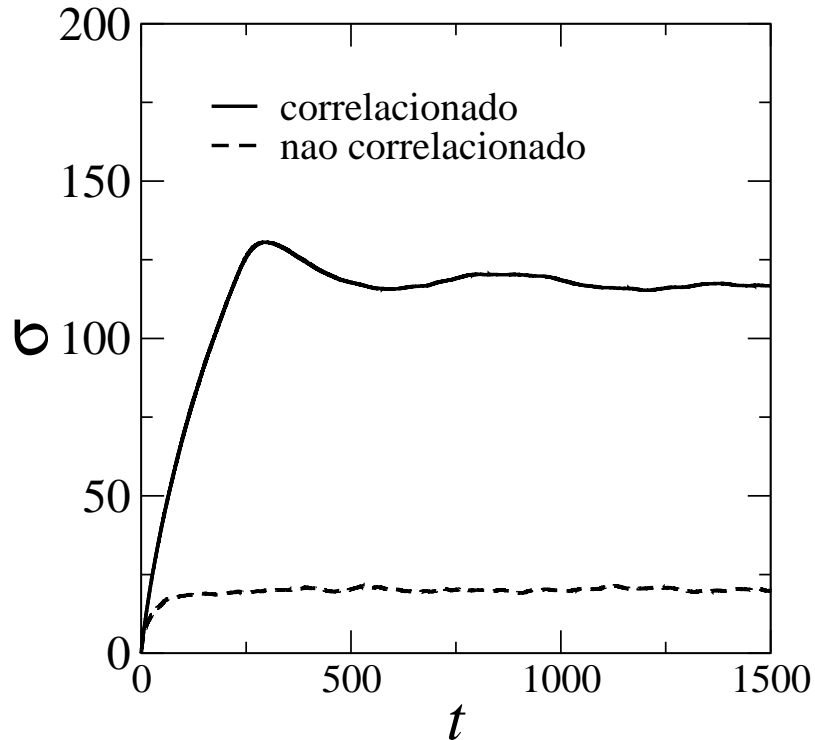


Figura 3.3: Gráfico do desvio médio quadrático em função do tempo para duas sequências com N nucleotídeos

dupla com correlações cruzadas (linha pontilhada) apresenta um desvio médio quadrático maior, indicando que, de fato, correlações cruzadas promovem uma diminuição da localização dos estados eletrônicos.

Na figura 3.2 apresentamos uma análise de tamanho finito do desvio médio quadrático do modelo de cadeia dupla correlacionado. Calculamos o desvio médio quadrático reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N para diversos tamanho (de $N = 500$ até $N = 16000$). Podemos observar que, à medida que aumentamos o número de nucleotídeos, σ/N tende a zero. Este comportamento é um indício de que, no limite termodinâmico, os estados são, de fato, localizados e nenhum transporte ocorre.

3.1.2 Resultados caso 2

Como pode ser observado na figura 3.3, o valor de σ é maior quando há correlação. Para esta molécula de N sítios, a função de onda pode se estender por mais de 100 sítios quando há correlação e por apenas pouco mais de 20 sítios quando não há correlação. Conforme já

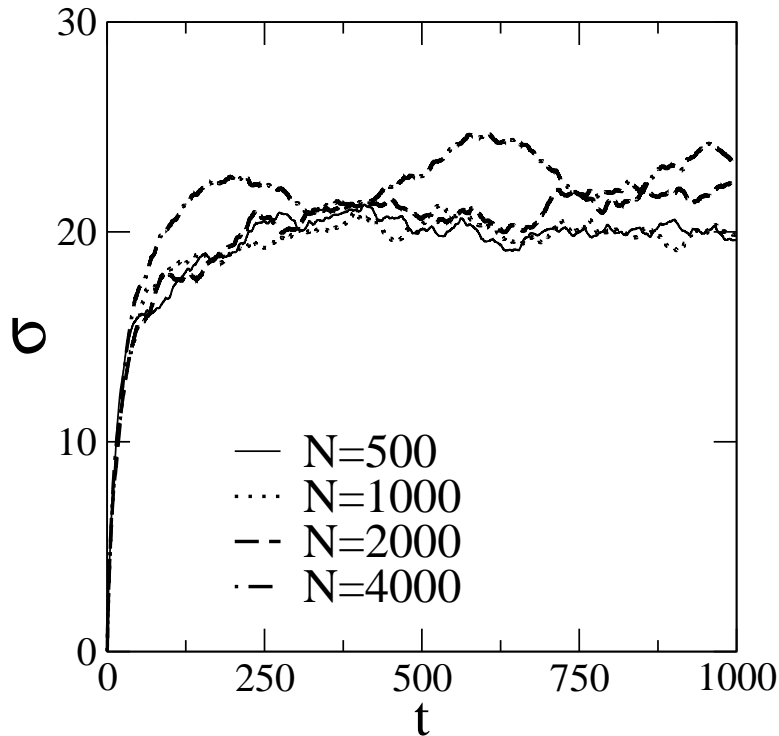


Figura 3.4: Gráfico do desvio médio quadrático em função do tempo para moléculas com 500, 1000, 2000 e 4000 sítios quando não há correlação

se esperava, a correlação de curto alcance influencia no desvio médio quadrático, facilitando o transporte de elétrons na rede. Vamos apresentar uma análise um pouco mais detalhada dos dois casos.

Inicialmente, vamos considerar o caso não correlacionado. A figura 3.4 mostra o desvio médio quadrático em função do tempo para moléculas sem correlação com 500, 1000, 2000 e 4000 sítios. Observamos que σ é praticamente constante e independente do tamanho da amostra. Este resultado apenas confirma a já esperada localização dos estados eletrônicos em baixa dimensionalidade prevista pela teoria de escala. O caso correlacionado é o motivo da polêmica e do debate bastante instrutivo encontrado nas referências[24, 25]. De fato, foi sugerido que as correlações cruzadas seriam responsáveis por estados estendidos em modelos de cadeias duplas [24]. A existência ou não de estados estendidos, bem como uma verdadeira transição metal-isolante induzida por correlações cruzadas, foram objeto de estudo da referência[25]. Vamos apresentar uma análise que pode fornecer alguns indícios para tentar esclarecer este debate. Na figura 3.5, apresentamos o desvio

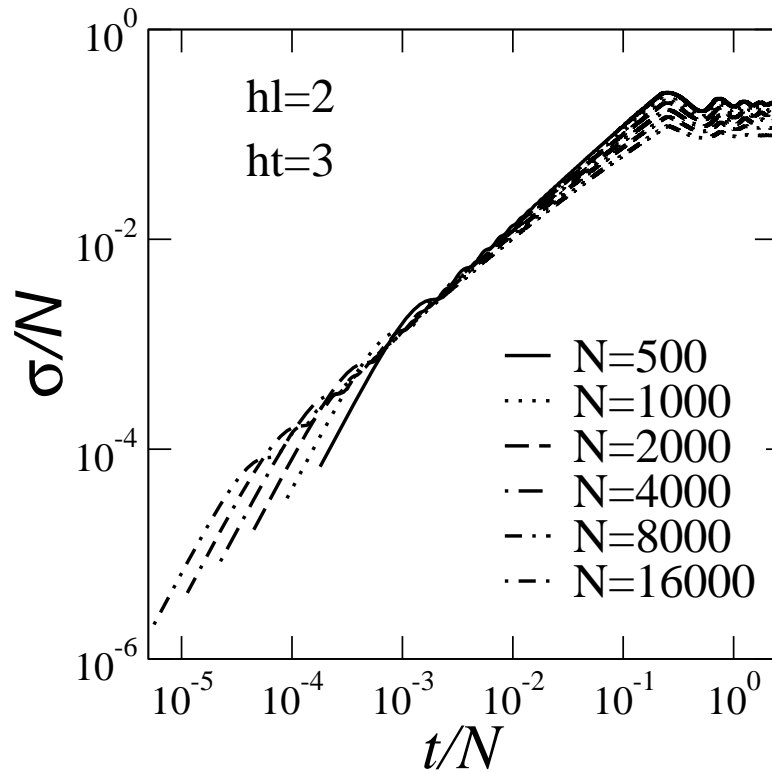


Figura 3.5: Desvio médio quadrático reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N calculado em cadeias duplas correlacionadas com $N = 500, 1000, 2000, 4000, 8000$ e 16000 sítios. σ/N diminui quando N cresce indicando que as correlações cruzadas não são suficientes para gerar estados realmente estendidos no limite termodinâmico.

médio quadrático reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N . Consideramos cadeias duplas correlacionadas com $500, 1000, 2000, 4000, 8000$ e 16000 sítios e também os mesmos termos de *hopping* utilizados na ref.[24]: $hl = 2$ e $ht = 3$, em eV. Em geral, na presença de estados estendidos, o desvio médio quadrático é proporcional ao número de sítios ($\sigma \propto N$). Podemos ver na figura 3.5 que σ/N diminui quando N cresce. Logo, estes dados sugerem a ausência de estados realmente estendidos no limite termodinâmico. Por último, vamos estudar o efeito do *hopping* transversal sobre as propriedades de transporte no DNA artificial em estudo. Na figura 3.6 apresentamos o desvio médio quadrático σ versus tempo t calculado em uma cadeia dupla correlacionada com $N = 2000$ sítios. Neste caso, consideramos $hl = 1$ e $ht = 1, 2, 4$, todas as unidades em eV. Podemos observar que, quando o *hopping* transversal fica mais intenso, o desvio médio quadrático cresce. De fato, as correlações cruzadas, apesar de por si só não serem suficientes para induzir

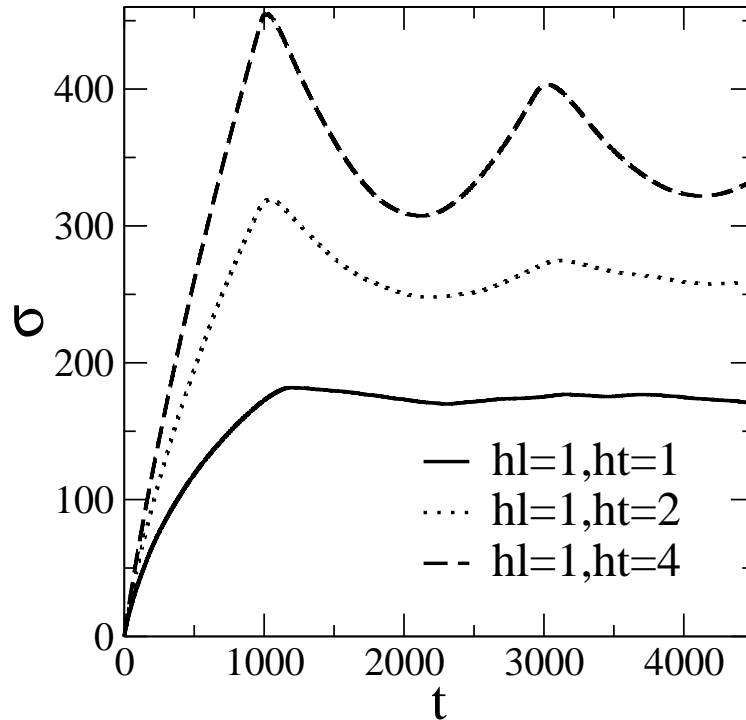


Figura 3.6: Gráfico do desvio médio quadrático em função do tempo para diferentes valores de *hopping* transversal

estados estendidos, reduzem o grau de localização dos autoestados. Quanto mais intenso o acomplamento entre as cadeias, mais o papel das correlações cruzadas fica evidente. Este resultado pode ser visto claramente na figura 3.6. Gostaríamos de salientar um outro aspecto importante. No presente caso, que é exatamente o mesmo modelo tratado na ref.[24], foi escolhido um emparelhamento $(0.5, -0.5)$ e $(0.3, -0.3)$. Logo a energia *on site* transversal média ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle$) é nula para qualquer valor de c . Este ingrediente também proporciona um crescimento do comprimento da localização. Na figura 3.7, comparamos o desvio médio quadrático temporal obtido anteriormente para cadeias duplas correlacionadas com a energia *on site* transversal média nula com o caso onde ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle \neq 0$). Podemos observar que, como já foi comentado anteriormente, σ é maior em cadeias com ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle = 0$). Para entender este fato basta pensar que no limite de $ht \rightarrow \infty$ e ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle = 0$) a geometria de cadeia se comporta como um sistema de uma dimensão de energia *on site* nula.

Nossos resultados numéricos baseados na dinâmica de um elétron inicialmente localizado fornecem fortes indícios numéricos de que todos os estados eletrônicos são loca-

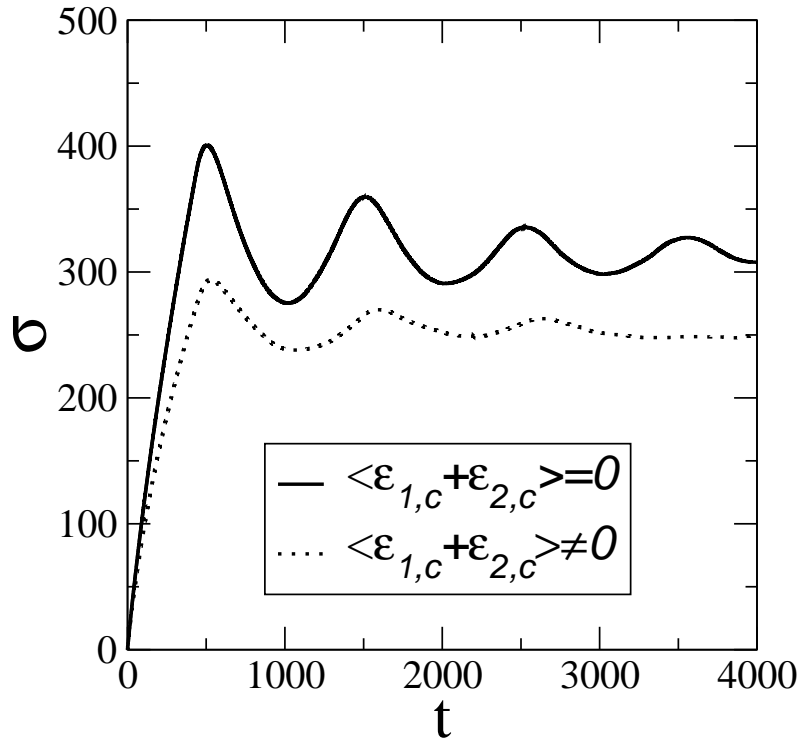


Figura 3.7: Comparação entre o desvio médio quadrático temporal obtido em cadeias duplas correlacionadas com a energia *on site* transversal média nula ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle = 0$) e o desvio médio quadrático calculado para o caso no qual ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle \neq 0$).

lizados em cadeias duplas contendo apenas correlações cruzadas. De fato, a existência de correlações cruzadas eleva o comprimento de localização se comparado com o caso não correlacionado. Estudando o modelo de DNA artificial utilizado na ref.[24], percebemos que existem dois ingredientes que favorecem uma maior distribuição espacial da função de onda eletrônica: as correlações cruzadas e o fato que a energia *on site* transversal média ($\langle \epsilon_{1,c} + \epsilon_{2,c} \rangle$) ser nula. Entretanto, temos indícios numéricos que sugerem que não existem de fato estados estendidos no limite termodinâmico.

Capítulo 4

Conclusão

Neste trabalho de conclusão de curso, estudamos um formalismo analítico/numérico para resolver a equação de schrödinger para um elétron em um sistema desordenado de baixa dimensionalidade. Aplicamos o formalismo de Anderson apresentado no capítulo 2 em sistemas físicos que vêm despertando o interesse acadêmico nas últimas décadas. Consideramos um modelo consistido de um elétron movendo-se em duas cadeias acopladas, nas quais sua energia de ligação em cada sítio destas cadeias, também chamada de energia *on site*, foi considerada aleatória. Fizemos então correlações transversais entre as energias *on site* das duas cadeias e comparamos com os casos de quando não há tal correlação. Estas correlações transversais entre as energias *on site* são encontradas no DNA e são, de acordo com publicações recentes, ingredientes chaves para a existência de estados eletrônicos metálicos.

Nossos resultados numérico baseados na dinâmica de um elétron inicialmente localizado fornecem fortes indícios numéricos de que todos os estados eletrônicos são localizados em cadeias duplas contendo apenas correlações cruzadas. As correlações cruzadas até facilitam o aumento do comprimento de localização quando comparado com o caso sem correlação, mas não o suficiente para se obter estados estendidos. Desta maneira, no limite termodinâmico, os estados são localizados e não há transporte eletrônico.

Referências Bibliográficas

- [1] Braun E., Y. Eichen, U. Sivan, and G. Ben-Yoseph, 1998, Nature (London) **391**, 775.
- [2] de Pablo, P. J., F. Moreno-Herrero, J. Colchero, J. Gómes Herrero, P. Herrero, A. M.Bar, P. Ordejón, J. M. Soler, and E. Artacho, 2000, Physical Review Letters **85**, 4992.
- [3] Storm, A. J., J. Van Noort, S. De Vries, and C Dekker, 2001, Appl. Phys. Lett. **79**, 3881.
- [4] Cai, L., H. Tabata, and T. Kawai, 2001, Nanotechnology **12**, 211.
- [5] Zhang, Y., R. H. Austin, J. Kraeft, E. C. Cox, and N. P. Ong, 2002, Physical Review Letters **89**, 198102.
- [6] Porath, D., A. Bezryadin, S. De Vries, and C. Decker, 2000, Nature (London) **403**,635.
- [7] Rakitin, A., P. Aich, C. Papadopoulos, Y. Kobzar, A. S. Vedeneev, J. S. Lee, and J.M. Xu, 2001, Physical Review Letters **86**, 3670.
- [8] Fink, H. W., and C. Schönberger, 1999, Nature (London) **398**, 407.
- [9] Kasumov, A. Y., M. Kociak, S. Gueron, B. Reulet, and V. T. Volkov, 2001, Science **291**, 280.
- [10] DNA: o nosso código secreto, www.cienciaviva.org.br
- [11] <http://www.molecularstation.com/images/chemical-structure-dna.gif>
- [12] R.G. Endres, D.L. Cox, and R.R.P. Singh, Reviews of Modern Physics, 2004, **76**,195-214.

- [13] H. Lodish, D. Baltimore, A. Berk, S.L. Zipursky, P. Matsudaira, J. Darnell, Molecular Cell Biology, Scientific American Book Inc., 1995.
- [14] E.L. Albuquerque, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, Physica A 370 (2006) 625.
- [15] <http://www.universitario.com.br/celo/topicos/subtopicos/genetica/dna/dna.html>
- [16] Murphy, C. J., M. R. Arkin, Y. Jenkins, N. D. Ghatlia, S. H. Bossmann, N. J. Turro, and J. K. Barton, 1993, Science **262**,1025.
- [17] Carpena, P., P. Bernaola-Galván, P. Ch. Ivanov, and H. E. Stanley, 2002, Nature (London) **418**, 955.
- [18] Young, M. A., G. Ravishanker, and D. L. Beveridge, 1997, Biophys. J. **73**, 2313.
- [19] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Winston, Philadelphia 1976).
- [20] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492, (1958).
- [21] F. A. B. F. de Moura, *Transição de Anderson em Sistemas de Baixa Dimensionalidade com Desordem Correlacionada*, Tese de Doutorado, Departamento de Física - UFPE, Recife (2003)
- [22] E. M. Nascimento, *Excitações de 1 e 2 mágnons em cadeias desordenadas: Aspectos estáticos e dinâmicos*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física - UFAL, Maceió (2005)
- [23] I. F. dos Santos, *Comportamento de escala nas vizinhanças da transição de Anderson de Sistemas com Desordem Correlacionada*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física - UFAL, Maceió (2007)
- [24] R.A. Caetano and P.A. Schulz, Phys. Rev. Lett. **95** 126601 (2005).
- [25] A. Sedrakyan and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. Lett. **96** 059703 (2006); R. A. Caetano and P. A. Schulz, , Phys. Rev. Lett. **96**, 059704 (2006)
- [26] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and E.L. Albuquerque, J. Phys.: Condens. Matter, **20**, 075109 (2008).
- [27] F.A.B.F. de Moura, E.D. Albuquerque, M.S. Vasconcelos Phys. Rev. E, **71** , 021910 (2005).