

# Comportamento de Escala nas Vizinhanças da Transição de Anderson de Sistemas com Desordem Correlacionada

ILDEMIR FERREIRA DOS SANTOS

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Comportamento de Escala nas Vizinhanças da Transição de Anderson de Sistemas com Desordem Correlacionada

ILDEMIR FERREIRA DOS SANTOS

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

Orientador:

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Co-Orientador:

Prof. Marcelo Leite Lyra

Maceió - Brasil

Janeiro - 2007



**Universidade Federal de Alagoas**  
**Instituto de Física**  
Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões  
Cidade Universitária  
Tabuleiro dos Martins  
57072-970 Maceió - AL, Brasil

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE**  
**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

***"Comportamento de escala nas vizinhanças da transição de Anderson de***  
***Sistemas com Desordem Correlacionada"***

**por**

***Idemir Ferreira dos Santos***

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (Orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Umberto Laino Fulco, do Departamento de Física da UFRN, consideram o candidato aprovado com grau "A".

Maceió, 28 de fevereiro de 2007

  
Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

  
Prof. Marcelo Leite Lyra

  
Prof. Umberto Laino Fulco

A meus pais, *Isaías e Maria*

## AGRADECIMENTOS

Meu tempo de mestrado foi repleto de dias muito difíceis, muito a aprender, muita responsabilidade e cobranças, dificuldades e defeitos na formação a serem sanados, foram alguns dos obstáculos a serem superados mas, nenhum deles era comparado a falta que sentia da minha família, dos meus amigos, da minha terra. Sem as pessoas que citarei de forma resumida certamente eu não teria conseguido, então a elas meus sinceros agradecimentos hoje e sempre:

Agradeço a meu orientador Prof. Francisco Fidelis. Sua rapidez em desenvolver suas atividades, sua eficiência como profissional, são algumas das qualidades nas quais procuro me espelhar e as quais procuro seguir, embora nem sempre consiga. Agradeço por todas as coisas que aprendi com ele, por sua paciência quase infinita, por sua prestatividade e seriedade, que são atributos que o tornam um grande orientador.

Agradeço a meu co-orientador Prof. Marcelo Lyra, profissional de extrema competência, pela participação decisiva neste trabalho, sempre acompanhando o trabalho de perto com idéias e soluções imprescindíveis.

Agradeço às minhas irmãs Francisca e Iságila pela força que sempre me deram em momentos difíceis, pela compreensão e pelos ótimos momentos que vivi em companhia das duas, e que anseio viver novamente. Vocês, mesmo estando longe, sempre tornaram meu caminho menos árduo.

Agradeço a meu irmão Ildon, que da sua forma também contribuiu na minha caminhada, sempre me encorajando e fazendo da conversa sobre problemas difíceis uma agradável conversa.

Agradeço a meus pais Isaías e Maria pelo apoio incondicional em todos os momentos da minha vida e pela confiança que sempre depositaram em mim.

Agradeço a Marta e a Indianara. A primeira, talvez sem se dar conta, me ajudou muito nesse período me dando a tranqüilidade de que precisava, e a segunda por me dar momentos de grande alegria e sempre esperar ansiosa pelo meu retorno, ainda que seja de poucos dias.

Agradeço a todos os meus amigos do Piauí, em especial a Fábio, Odailton, Hélcio, Gracilvone, Keilane, Wanessa e muitos outros pela grande amizade e por tornar meus dias no Piauí inesquecíveis.

Agradeço a todos dos professores do IF, pela acolhida que me deram e em especial aos professores Iram, Gandhi e Solange, com os quais convivi mais de perto tendo a oportunidade de pagar disciplinas e aprender algo a mais.

Agradeço a todos os amigos que fiz no IF neste período de mestrado e, aos que vieram junto comigo do Piauí.

Agradeço a todos os funcionários do IF que sempre contribuem para o bem estar de todos, e por me ajudarem diversas vezes.

Agradeço a CAPES pelo apoio financeiro à continuidade dos meus estudos.

Agradeço a Deus por todos os momentos difíceis e bons que passei, pois em cada um deles tive a certeza de que Ele estava comigo.

---

## Resumo

A teoria de localização é o formalismo mais importante para o entendimento do movimento de elétrons não interagentes em sistemas desordenados. A teoria de escala prevê em sistemas de baixa dimensionalidade a ausência de uma transição localização-deslocalização para qualquer grau de desordem não correlacionada. Entretanto, no modelo bidimensional regimes dinâmicos distintos podem ser observados de acordo com a intensidade da desordem. Mais recentemente, o modelo de Anderson com desordem correlacionada tem mostrado a quebra das previsões da teoria de escala. Foi provado, numérica e experimentalmente, que correlações de longo alcance podem induzir uma transição metal isolante com um *mobility edge* separando estados localizados de estados estendidos. Neste trabalho, nós contribuimos nesta linha. Estudamos a natureza dos estados de um elétron no modelo de Anderson unidimensional e bidimensional, com correlações na distribuição da desordem. As correlações são introduzidas pelo uso de um método de transformada de Fourier discreta o qual produz uma distribuição de energia nos sítios com uma densidade espectral  $S(k) \propto 1/k^\alpha$ . Em uma dimensão, nós estudamos o caso estático e dinâmico, calculando a função de participação  $\xi$  e o desvio médio quadrático. Em ambos os casos identificamos regimes distintos de acordo com o grau de correlação  $\alpha$ . Para o caso 2d, investigamos o comportamento da flutuação relativa da participação que é usada para monitorar o ponto crítico. Nossos dados numéricos sugerem que o expoente crítico da função de participação governa o colapso dos dados para a flutuação relativa da energia  $\eta(E)$ . Encontramos ainda o diagrama de fases que mostra regiões de estados estendidos, críticos e localizados.

## Abstract

The Anderson localization theory is the most important formalism to understand non-interacting electrons moving in disordered systems. The scaling theory predicts in low dimensional systems the absence of a localization-delocalization transition for any degree of uncorrelated disorder. However, in the two-dimensional model, distinct dynamical regimes can be observed according to the disorder intensity. More recently, the Anderson model with correlated disorder have been shown to break up the scaling theory predictions. It was numerically and experimentally proved that long range correlations can be induce a metal-insulator transition with mobility edges separating localized from extended states. In this work, we contribute along these lines. We study the nature of one-electron states in one-dimensional and two-dimensional Anderson models with long-range correlations in the disorder distribution. The long-range correlations was introduced by using a discrete Fourier method which produces a distribution of the energies in the sites with spectral density  $S(k) \propto 1/k^\alpha$ . In one-dimension, we study the static and dynamic case calculating the participation number function  $\xi$  and the wave-packet mean square displacement. In both the cases, we identify distinct regimes depending on the correlation degree  $\alpha$ . For the 2d model, we investigate the behavior of the relative fluctuation of the participation number that is used to monitor the critical point. Our numerical data suggest that the localization length exponent governs the data collapse of the relative fluctuations as a function of the energy  $\eta(E)$ . We still obtained the phase diagram that shows regions of extended, critical and localized states.



# Sumário

Folha de rosto . . . . .	i
Dedicatória . . . . .	ii
Agradecimentos . . . . .	iii
Resumo . . . . .	v
Abstract . . . . .	vi
Sumário . . . . .	vii
<b>1 Fundamentação Teórica</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução . . . . .	1
1.2 Um pouco de estado sólido e modelos . . . . .	2
1.2.1 A evolução dos modelos de condução. . . . .	2
1.2.2 Modelos de condução . . . . .	4
1.2.3 Bandas de energia e metais . . . . .	6
1.3 Transições metal-isolante . . . . .	9
1.4 Teoria de Localização . . . . .	11
1.5 O modelo de Anderson . . . . .	14
1.6 Teoria de escala para transição de Anderson . . . . .	17
1.7 Violação da Teoria de Escala . . . . .	21
1.7.1 Modelo aperiódico . . . . .	21
1.7.2 Modelos com desordem correlacionada . . . . .	22
<b>2 Modelo de Anderson Unidimensional com Correlações de Longo Alcance</b>	<b>25</b>
2.1 Correlações de longo alcance . . . . .	26
2.2 O Modelo . . . . .	28

---

<b>3</b>	<b>Modelo de Anderson com Correlações de Longo Alcance em Duas Dimensões</b>	<b>40</b>
3.1	Introdução . . . . .	40
3.2	O Modelo . . . . .	43
3.3	Resultados . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>52</b>
	<b>Referências</b>	<b>54</b>

# Capítulo 1

## Fundamentação Teórica

### 1.1 Introdução

O entendimento das propriedades físicas dos sólidos sempre foi de fundamental importância para o desenvolvimento da ciência e tecnologia. Este entendimento se tornou mais amplo com o advento da mecânica quântica, que possibilitou a explicação de fenômenos até então pouco compreendidos. Há modelos que descrevem com boa aproximação o comportamento da condução, quer seja de calor ou de elétrons em sólidos, em uma rede cristalina sem desordem. Os modelos cristalinos têm as quasi-partículas e excitações (fônons e mágnons) representadas como funções de onda estendidas. No entanto, a grande maioria dos sistemas físicos reais não têm simetria translacional, apresentando dessa forma algum tipo de desordem natural ou produzida em laboratório, oriundas de impurezas, dopagens, defeitos, etc. Dependendo do grau da desordem, seus efeitos não poderão ser desprezados e teremos que adotar modelos que contemplem essa característica, para um entendimento completo de suas propriedades. Tais modelos podem ter uma desordem estrutural, na qual átomos idênticos são colocados em um arranjo espacial desordenado ou, uma desordem composicional, na qual uma rede ordenada possui átomos de diferentes

tipos. Se na distribuição da desordem existe correlação o sistema é dito temperado, se não, é recozido.

No estudo das propriedades dos sólidos com desordem, o modelo de Anderson certamente foi de importância crucial para seu entendimento, sobretudo na transição metal-isolante. Sólidos com propriedade de conduzir calor ou elétrons são ditos metálicos, e os que não as possuem, isolantes. Anderson mostrou que a natureza dos estados eletrônicos em sólidos desordenados apresentam uma forte dependência com o grau de desordem existente[1]. Para desordem fraca as funções de onda eletrônicas são estendidas e o comportamento do sistema é tipicamente metálico[2, 3]. Para desordem forte os estados eletrônicos são exponencialmente localizados e o material torna-se isolante. Para um grau de desordem intermediário o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante. O estudo da localização de funções de onda quântica como consequência da presença da desordem é de fundamental importância para o entendimento da existência de metais e isolantes, e é claro da transição metal-isolante.

## 1.2 Um pouco de estado sólido e modelos

Nesta seção mostraremos alguns conceitos básicos de estado sólido bem como propriedades de transporte eletrônico ou de energia em redes cristalinas. Uma discussão mais detalhada pode ser encontrada nas referências[4, 5, 6].

### 1.2.1 A evolução dos modelos de condução.

Nos últimos cem anos os físicos vêm desenvolvendo modelos para estudar as propriedades de condução de sólidos com intensidade, interesse este estimulado pela ampla aplicabilidade destes modelos a sistemas reais, sobretudo os modelos que incorporam desordem. Um dos primeiros modelos de condução, que surgiu após a descoberta do elétron em 1897, foi o modelo de Drude.

Drude aplicou uma teoria cinética de gases a um metal tratando os elétrons de condução como um gás diluído. Em seu modelo, Drude desprezou as colisões entre elétrons, podendo estes apenas colidir com os íons da rede. A distribuição de velocidades para os

elétrons no modelo de Drude é, como no caso de um gás clássico de densidade  $n = N/V$ , dada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann.

O modelo de Drude apresenta algumas inconsistências. Este modelo mostra uma correta previsão da linearidade entre a densidade de corrente  $J$  e o campo elétrico  $E$ . No entanto, a condutividade  $\sigma$  ( $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ , onde  $e$  é a carga do elétron e  $m$  a massa do elétron) fica em função de um tempo médio entre as colisões  $\tau = l/v_m$ , onde  $l$  é o livre caminho médio entre colisões e  $v_m$  é a velocidade média dos elétrons. O livre caminho médio, de acordo com a teoria de Drude, é da ordem do espaçamento médio entre os íons e portanto independente da temperatura. A velocidade média dos elétrons pode ser obtida através do teorema da equipartição de energia como sendo  $v_m \propto T^{1/2}$ . Logo, o modelo de Drude previa que  $\sigma \propto T^{-1/2}$ . Experimentalmente, a temperatura ambiente, a condutividade de sólidos puros é inversamente proporcional a temperatura ( $\sigma \propto T^{-1}$ ). Para que o modelo de Drude pudesse reproduzir os resultados experimentais era necessário considerar que o livre caminho médio crescia com o decréscimo da temperatura como  $l \propto T^{-1/2}$ , o que era incompatível com a hipótese de colisão com os íons da rede. Ainda mais, para deduzir a dependência de  $\sigma$  com a temperatura  $T$  foi utilizada uma das previsões da teoria de Drude para a capacidade térmica do elétron ( $C_v = 3K_B/2$ ), a qual também não era observada experimentalmente. Drude desprezou interações como a que ocorre entre o elétron e as vibrações da rede, que no modelo quântico contribuem para o espalhamento eletrônico. Neste caso o livre caminho médio depende da temperatura, fazendo com que a dependência da condutividade com a temperatura concorde com os resultados experimentais, discussão mais detalhada pode ser encontrada na referência [4].

Estas inconsistências só puderam ser melhor explicadas com a mecânica quântica. O princípio de exclusão de Pauli requer que a distribuição de Maxwell-Boltzmann seja trocada pela de Fermi-Dirac. Teorias como as de Sommerfeld e Bloch são ótimos exemplos desta nova visão de mundo. O primeiro atacou o problema de condução como sendo um gás de elétrons livres, o segundo levou em conta a existência de potenciais constantes no tempo, interagindo com os elétrons, o que na verdade torna-se mais real que a hipótese de Sommerfeld, uma vez que na natureza os elétrons estão sujeitos a interações.

### 1.2.2 Modelos de condução

Entre os modelos de condução dois deles têm destaque notório, o modelo de Bloch e o modelo de Anderson. O primeiro considera potenciais periódicos na rede, o segundo contempla a desordem nos potenciais.

No modelo do elétron livre temos um número infinito e constante de valores permitidos de energia:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.1)$$

com função de onda dada por

$$\psi_k = \exp(ik \cdot r). \quad (1.2)$$

Se agora no modelo do elétron livre colocarmos um potencial periódico de núcleos iônicos, neste cristal ocorrerão as chamadas reflexões de Bragg. A função de onda ao se propagar no cristal encontrará barreiras e será refletida. A função de onda pode ser dada por um arranjo simétrico e antisimétrico das funções de onda do modelo do elétron livre de ondas se propagando em direções opostas. Teremos então:

$$\psi(+) = \exp(i\pi x/a) + \exp(-i\pi x/a) = 2\cos(\pi x/a) \quad (1.3)$$

$$\psi(-) = \exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a) = 2i\sin(\pi x/a), \quad (1.4)$$

as quais são ondas estacionárias formadas por porções iguais de ondas que se propagam para a direita e para a esquerda, em uma dimensão, resultado das reflexões. O gráfico da Fig. 1.1, mostra o potencial típico cristalino e as amplitudes de probabilidade respectivas  $|\psi(+)|^2$  e  $|\psi(-)|^2$ .

Bloch mostrou que para estados estacionários de um elétron em um potencial cristalino  $U(r)$  com periodicidade  $U(r + R) = U(r)$ , onde  $R$  é um vetor de Bravais típico da rede, as funções de onda tinham uma forma especial, que será mostrada a seguir.

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

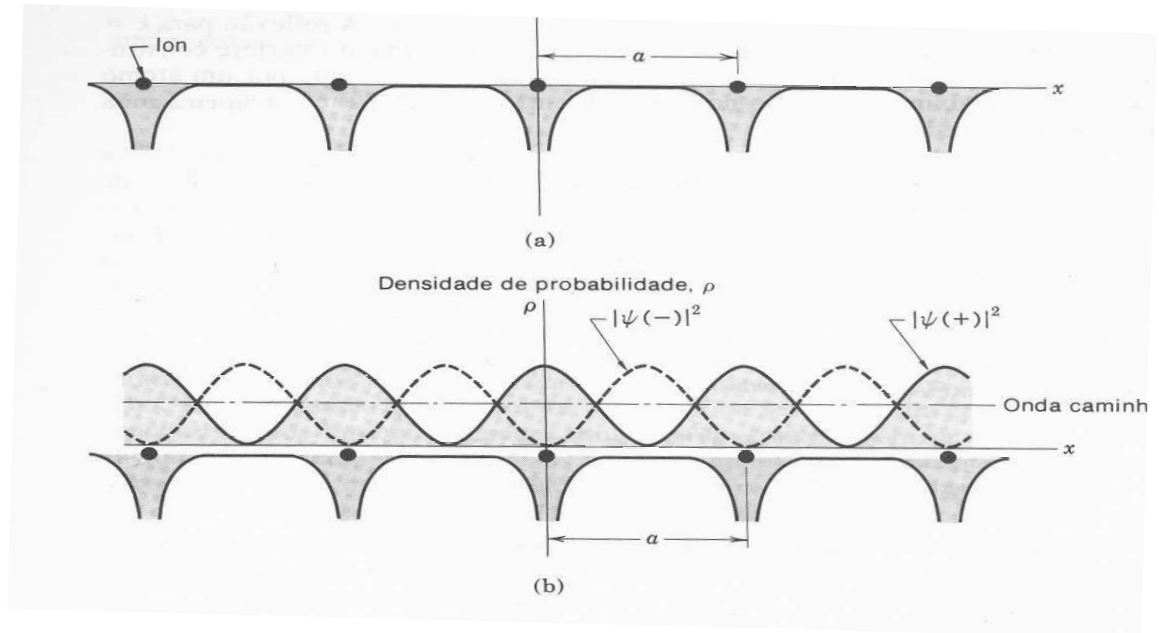


Figura 1.1: Padrão típico de um potencial cristalino.

é o da Fig. 1.1.

Para encontrar as funções de Bloch temos que resolver o Hamiltoniano:

$$H\psi = \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi = E\psi, \quad (1.5)$$

onde o potencial  $U(r)$  tem a periodicidade da Fig. 1.1. A equação de Schrödinger para o elétron livre é um caso particular da Eq. 1.5 fazendo o potencial igual a zero, que é um exemplo simples de periodicidade. Elétrons independentes que obedecem a Eq. 1.1 são conhecidos como elétrons de Bloch (os elétrons de Bloch se tornam elétrons livres quando o potencial periódico  $U(r)$  é identicamente nulo). Os estados estacionários  $\psi(r)$  do Hamiltoniano de um único elétron  $H = p^2/2m + U(r)$  podem ser escolhidos tendo a forma de uma onda plana vezes uma função que retém a periodicidade da Rede de Bravais:

$$\psi_{n,k}(r) = e^{ik \cdot r} u_{n,k}(r), \quad (1.6)$$

onde

$$u(r + R) = u(r), \quad (1.7)$$

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

$$\psi(r + R) = e^{ik \cdot R} \psi(r). \quad (1.8)$$

Os autoestados de Bloch envolvem um vetor de onda  $k$  que tem propriedades semelhantes ao vetor de onda  $k$  do modelo do elétron livre. Note entretanto que, no modelo do elétron livre o vetor de onda é simplesmente  $p/\hbar$ , onde  $p$  é o momento linear de um elétron. Na teoria de Bloch podemos visualizar o vetor de onda  $k$  como um número quântico que caracteriza as invariâncias translacionais de um potencial periódico. O índice  $n$  aparece no teorema de Bloch pois para um dado  $k$  existem muitas soluções para a equação de Schrödinger. Para cada índice quântico  $n$ , o conjunto de níveis eletrônicos especificados por  $E_n(k)$  é chamado de banda de energia. Cada banda contém  $2N$  orbitais, onde  $N$  é o número de células primitivas no cristal e o fator 2 vem da degenerescência de spin. Se houver um único átomo com valência por célula primitiva, a banda pode ser preenchida até a metade com elétrons. Se contribuir com dois a banda pode ser preenchida completamente, pois aí preencheria todos os  $2N$  orbitais. Materiais com bandas completamente cheias ou completamente vazias são isolantes porque assim nenhum elétron poderia se mover sob a ação de um campo elétrico. Se a banda estiver parcialmente preenchida, o material será um condutor. Na seção seguinte mostraremos de forma breve alguns conceitos de bandas de energia.

### 1.2.3 Bandas de energia e metais

Quando resolvemos o Hamiltoniano para um determinado modelo que descreve o comportamento de um sólido, encontramos um espectro de energias permitidas para o sistema. Essas energias permitidas são as chamadas bandas de energia.

A forma como as bandas de energia estão dispostas nos sólidos é diferente para metais e isolantes. Por exemplo, para uma cadeia linear quanto a disposição dos íons que produzem os potenciais, a solução da equação de autovalores fornece para energias [7]:

$$E = E(k) = E_0 - 2A \cos(kl), \quad (1.9)$$

onde  $k$  é uma constante com dimensão de inverso de comprimento,  $l$  é a distância entre



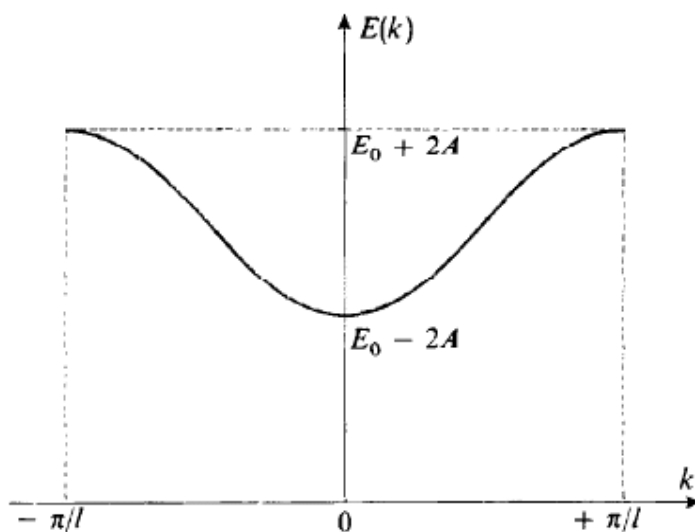


Figura 1.2: Energias permitidas para um elétron.

ions adjacentes e  $A$  é uma constante de acoplamento. Se  $k$  pertence a primeira zona de Brillouin  $-\frac{\pi}{l} \leq k < +\frac{\pi}{l}$ , temos o gráfico Fig. 1.2, que mostra que nem toda energia é permitida.

Os estados permitidos podem ou não estar ocupados por elétrons. No estado fundamental todos os níveis de energia abaixo de uma certa energia  $E_f$ , estão ocupados. A energia do nível preenchido mais elevado do estado fundamental é a energia de Fermi  $E_f$ .

As propriedades elétricas do sistema são basicamente determinadas por elétrons que tem energias próximas a  $E_f$ . Se a energia de Fermi estiver dentro de uma banda de energia permitida, o nível de Fermi  $\mu$  é igual a  $E_f$ . O nível de Fermi ou potencial químico, diz respeito a probabilidade de um estado com energia  $E$  está ocupado,  $P(E, T) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}$ . Os elétrons com energias próximas a  $E_f$  podem facilmente ser excitados a ocupar os níveis ainda vazios da banda de energia. Um sólido para o qual a energia de Fermi está dentro de uma banda permitida é um condutor. Por outro lado se tivermos um sólido composto por bandas inteiramente ocupadas ou inteiramente vazias, a energia  $E_f$  será igual ao limite superior de uma banda permitida e o nível de Fermi  $\mu$  cai numa região proibida. Para que os elétrons possam ser excitados neste caso, uma quantidade de energia grande deve ser fornecida aos mesmos para que estes ultrapassem a zona proibida. Para que um material

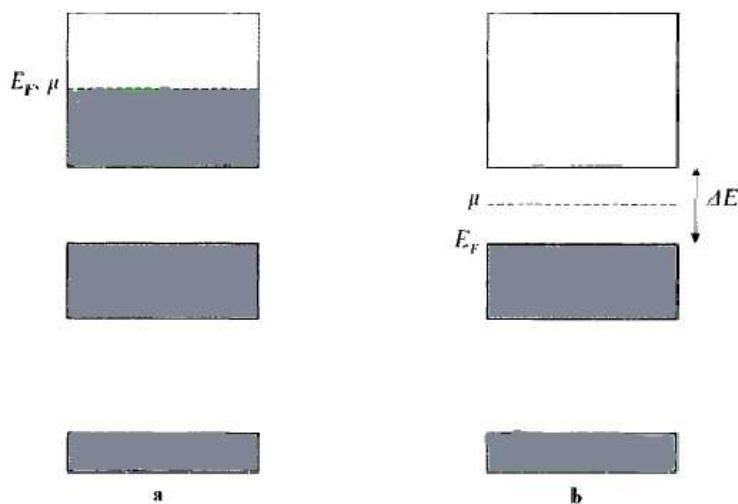


Figura 1.3: Bandas de energia para um condutor(a) e um isolante(b) .

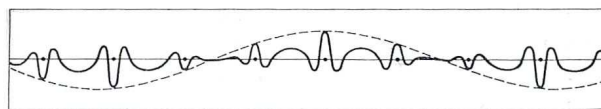


Figura 1.4: Padrão típico de uma função de onda para um elétron de Bloch.

seja um bom isolante a largura  $\Delta E$  deve ser da ordem de  $KT$ . Se esta largura for pequena o material será um semiconductor.

A figura Fig. 1.3 mostra um esquema das bandas de energia para materiais condutores a) e isolantes b). Uma mudança na temperatura ou pressão pode acarretar numa mudança na estrutura de bandas ocasionando uma transição metal-isolante. Para ambos os casos a função de onda do sistema são as funções de onda de Bloch, que se estendem por todo o sistema como consequência da periodicidade do potencial cristalino. A figura Fig. 1.4 mostra um esquema para uma função de onda de Bloch típica.

Em geral, os elétrons são espalhados apenas por imperfeições na rede cristalina as quais podem ter origem nas próprias vibrações da rede ou na presença de impurezas no cristal.

As teorias baseadas em potenciais periódicos e elétrons não interagentes são ide-

alizações. Sólidos reais nunca são absolutamente puros e apresentam interações entre os elétrons. Teorias de bandas que tratam sólidos não puros ou elétrons interagentes são bastante aceitas para se explicar as propriedades de dispositivos eletrônicos como junções  $pn$ . Na seção seguinte, vamos estudar os efeitos de interações elétron-elétron bem como efeitos de desordem sobre a natureza dos estados estacionários.

## 1.3 Transições metal-isolante

Dentro da linha de modelos de condução, o primeiro trabalho que contemplava a desordem foi mostrado no artigo de P.W Anderson[1]. Neste artigo ele formulou o problema e deu uma estimativa qualitativa da intensidade do potencial aleatório o qual é necessário para a ausência de difusão em certas redes aleatórias. Depois disso Mott[8] discutiu a relevância da localização com respeito as propriedades de transporte em semicondutores amorfos. Ele propôs o conceito de *mobility edge*, a qual separaria estados localizados de estados estendidos.

O transporte eletrônico se dá de formas diferentes em cada tipo de material. Em materiais reais, sempre há uma certa desordem, e correlações entre os elétrons, o que não tínhamos considerado até agora. No estudo de transporte eletrônico estamos sempre interessados em saber até que ponto o material é condutor ou isolante, ou seja, estudar as possíveis transições metal-isolante do sistema. Destacaremos agora dois tipos dessas transições, a de Mott e a de Anderson.

A transição de Mott [9, 10] acontece quando há uma interação elétron-elétron onde uma configuração de estados é energeticamente mais favorecida que outra. Ao considerarmos por exemplo que cada átomo tenha apenas um elétron de valência, juntos formarão uma banda de largura  $B$  Fig. 1.5a. Numa fase metálica o elétron é livre para percorrer a rede e podemos ter orbitais vazios, com um elétron ou dois elétrons, com probabilidades  $1/4, 1/2$  e  $1/4$  respectivamente. A energia necessária para que dois elétrons ocupem o mesmo orbital é  $U = \langle e^2/r_{12} \rangle$ . Se a energia de interação elétron-elétron é menor que a largura da banda, esta configuração é energeticamente favorecida e os elétrons ficam deslocalizados, o material é condutor. Se por outro lado esse custo energético para que dois elétrons ocupem o mesmo orbital for maior que a largura da banda, não será mais vantajoso para sistema continuar com os elétrons possuindo tal mobilidade para percorrer

toda a rede, ficando então localizados, o material é agora isolante. Essa transição é dita induzida por correlação elétron-elétron.

Outro tipo de transição metal-isolante de grande importância é a transição de Anderson. A transição de Anderson é induzida por desordem, que ocorre com maior frequência na natureza. As mudanças decorrentes da introdução da desordem num sistema contendo elétrons livres, podem ser discutidas de forma qualitativa. As funções de onda para elétrons livres são funções estendidas por todo o espaço. Quando um potencial é introduzido, esta onda encontra uma barreira. Logo, parte da onda é transmitida e parte da onda é refletida na mesma. Se colocarmos mais barreiras, a onda será refletida várias vezes e o sistema agora terá ondas incidentes e ondas refletidas que podem interferir. Estas interferências podem mudar bastante a forma da função de onda no sistema, sobretudo se tivermos potenciais aleatórios, a função de onda não manterá a coerência de fase após as reflexões. Esses potenciais aleatórios podem ser gerados a partir de barreiras colocadas em lugares aleatórios da rede ou por barreiras que tenham intensidades aleatórias. Se a desordem for fraca a função de onda continua estendida por todo o sistema, mas perde a coerência de fase depois de muitas reflexões.

Se o grau de desordem é forte, a função de onda fica concentrada em uma pequena região do sistema, e é praticamente nula em outros lugares. Uma localização exponencial foi imposta a função de onda após interferências destrutivas.

Para desordens intermediárias pode haver uma transição metal-isolante, que vai depender da localização da energia de Fermi como já discutimos. No esquema da Fig. 1.5 mostramos o mecanismo da transição de Anderson. Os poços de potencial são sítios atômicos com a mesma separação espacial, cuja intensidade varia aleatoriamente mas dentro de uma largura  $W$  Fig. 1.5a. Também é mostrado o caso sem desordem, onde  $B$  é a largura da banda dos estados permitidos Fig. 1.5b.

Anderson mostrou em 1958 que se  $W/B$  for suficientemente grande todos os estados da banda de valência serão localizados, um critério para existir localização induzida por desordem:

$$W > B. \quad (1.10)$$

Quando a desordem no potencial é suficientemente grande todos os estados da banda são exponencialmente localizados entretanto se  $W/B \approx 1$ , estados estendidos e localizados podem aparecer no sistema. Os estudos de transições metal-isolante e conceitos como *mobility edges* introduzidos por Mott originaram a chamada teoria de localização.

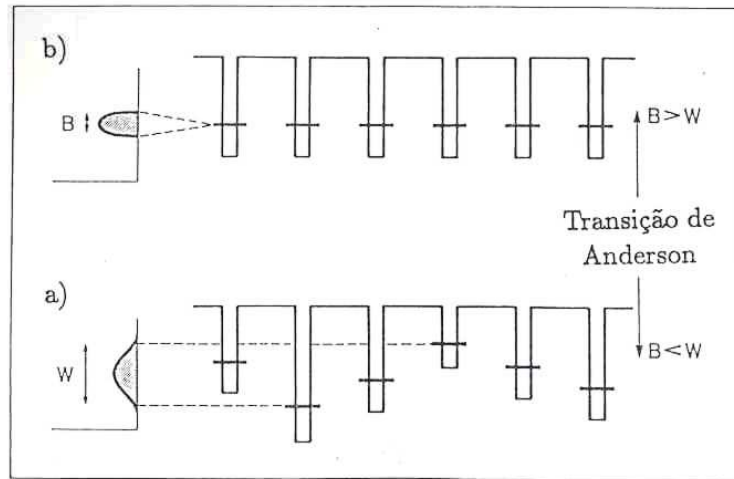


Figura 1.5: Diagrama ilustrativo para a transição de Anderson a) Potencial aleatório de largura  $W$  b) Potencial cristalino, aqui  $B$  é a largura da banda de energias permitidas

## 1.4 Teoria de Localização

Das seções anteriores tivemos idéia que uma transição entre estados quânticos deslocalizados e localizados dependem de alguns fatores tais como a energia de Fermi, existência e intensidade de desordem, interação eletrônica. Outros fatores, tais como pressão, composição, campo elétrico aplicado etc, que podem alterar a posição do nível de Fermi também influenciam na transição. Nesta seção mostraremos conceitos de localização, bem como formas de caracterizá-la, ferramentas usadas para se estudar propriedades de transporte eletrônico.

Pode-se compreender porque os estados de um único elétron na presença de um potencial desordenado são susceptíveis a localização. Uma maneira de se compreender isso é fazendo um análogo clássico ao modelo de Anderson, uma partícula num potencial aleatório [11]. Considerando uma partícula se movendo, sujeito a um potencial  $V(x)$  (unidimensional na direção  $x$ ) Fig. 1.6. Se a energia da partícula puder variar até  $E_0$ , podemos ter estados estendidos e localizados, se a energia for maior que  $E_0$ , a partícula está livre para se mover por todo o sistema. Porém quanticamente o fenômeno do tunelamento pode levar a uma completa deslocalização em regiões que classicamente seriam de estados localizados. De forma antagônica flutuações podem ocasionar interferências

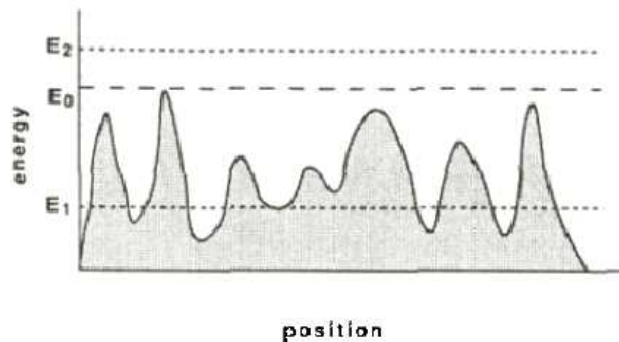


Figura 1.6: Analogia classica

produzindo uma localização em regiões onde teríamos estados deslocalizados numa visão clássica. Exemplos de localização por interferência é a localização já mencionada, quando ondas refletidas em barreiras de potencial interferem destrutivamente. Um exemplo de deslocalização por tunelamento é o que acontece com as funções de onda de Bloch, também já discutidas.

Um conceito importante foi introduzido por Mott em 1968, uma região de energia que separa estados localizados de estados estendidos, as chamadas *mobility edges*. A Fig. 1.7, mostra um gráfico da densidade de estados em função da energia. Vemos que para valores entre  $E_c$  e  $E_c'$  a densidade de estados é alta em relação a energias fora do espaço delimitado por  $E_c$  e  $E_c'$ . A região para a qual a densidade de energia é alta corresponde a estados estendidos, portanto *mobility edges* separam estados estendidos de localizados. Em geral a posição do *mobility edge* depende do grau da desordem. Se a desordem for alta ela irá para o centro da banda e o material será um isolante.

Uma boa comparação ajuda a entender o mecanismo da localização induzida pela desordem. Considere a Fig. 1.8 nela mostramos três regiões distintas, suponha que as partes escuras seja superfície sólida e as partes claras água. Essa situação seria semelhante ao caso quântico se considerarmos que as partes de terra firme correspondem a regiões com potencial  $V(r)$  e, as regiões que correspondem a água, regiões com energia  $E$ . Na Fig. 1.8a temos muitas regiões claras de forma que as regiões de terra firme não cercam nenhuma delas. Aqui  $E > V(r)$  e teríamos um oceano. Já na figura Fig. 1.8c temos várias regiões de água completamente cercada por terra firme, aqui  $E < V(r)$ , teríamos um lago. Assim de forma análoga teríamos uma transição oceano-lagos, ocorre uma transição estados deslocalizados-localizados. Um navio só teria possibilidade de percorrer o sistema

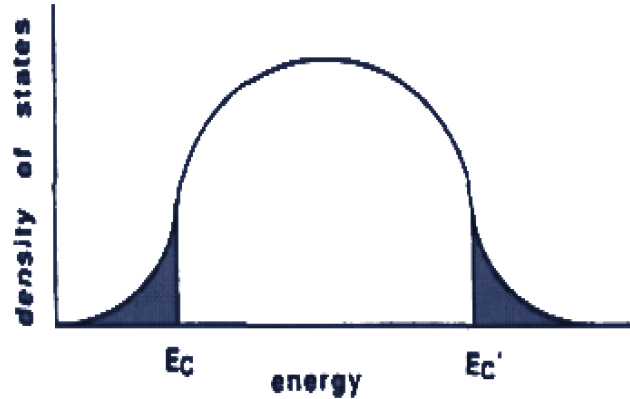


Figura 1.7: Esquema da *mobility edges*

para o caso da Fig. 1.8a, de outro modo ficaria preso.

A função de onda localizada em meios com potenciais aleatórios possui um comportamento assintótico descrito por um decaimento exponencial da função de onda, segundo um *comprimento de localização*  $\lambda$ , ou seja  $\psi(r) \sim e^{-r/\lambda}$ . O termo  $\lambda$  mede a largura típica da função de onda, e  $\lambda \rightarrow \infty$  corresponde a um estado estendido.

Outro critério usado no estudo da localização é o inverso do número de participação, ou segundo momento da densidade de probabilidade [12]:

$$P^{-1} = \sum_r |\psi(r)|^4. \quad (1.11)$$

Esta grandeza mede a porção do sistema onde a função de onda difere marcadamente de zero. Para estados estendidos temos  $P \sim 1/N$  com  $N$  sendo o número de sítios da rede, a medida que o tamanho da rede cresce  $P$  diminui. Para estados localizados  $P \sim 1/N_0$ , com  $N_0 < N$ , neste caso  $P$  praticamente não muda com o tamanho da rede. O inverso do número de participação para um tempo infinito também fornece a probabilidade que a partícula tem de retornar ao mesmo sítio.

O inverso do comprimento de localização também é usado para calcular grandezas como a condutância [13], bem como ter idéia sobre estados estendidos e localizados como em [14], essa grandeza é o expoente Lyapunov.

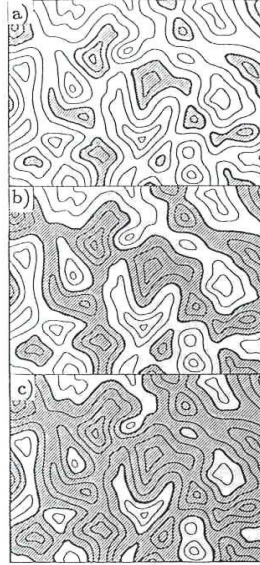


Figura 1.8: a)desordem fraca b)nível intermediário de desordem c) desordem forte

## 1.5 O modelo de Anderson

Como já discutido, a desordem nos materiais pode ter muitas origens. De acordo com essa origem um modelo é usado de forma a simular o comportamento do sólido. Estes modelos são aproximações.

Um modelo para uma desordem estrutural tal qual acontece em materiais amorfos pode ser dada pelo Hamiltoniano:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{j=1}^N V_j(r - R_j). \quad (1.12)$$

Aqui,  $p$  é o operador momento,  $m$  a massa efetiva da partícula e  $V_j$  a energia potencial do átomo no sítio  $R_j$ . A distribuição dos potenciais pode ser dada por uma função de distribuição  $P(R_j)$ . Para o caso simples onde a distribuição leva em conta que os  $N$  átomos são estatisticamente independentes em um volume  $\Omega$ , teremos que  $P(R_j) = \Omega^{-N}$ . Para outros tipos de desordem teríamos um novo Hamiltoniano.



O modelo de Anderson incorpora as características essenciais para o estudo de sistemas com desordem e representou sem dúvidas uma importante ferramenta para o estudo das transições metal-isolante. O Hamiltoniano que descreve o modelo em uma dimensão é dada por :

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (1.13)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano representa o termo de energia potencial onde  $\epsilon_i$  deve ser o termo que introduz potenciais aleatórios a fim de criar a desordem. O segundo termo é o termo cinético de *hopping* entre os sítios vizinhos. Os estados  $|i\rangle$  representam um orbital atômico centrado no sítio  $i$ , o conjunto de estados  $|i\rangle$  com  $i = 1, 2, 3..$  são ortogonais e formam um conjunto completo, no qual podemos expandir as auto-funções  $\psi$ , auto estados de  $H$ . As energias aleatórias  $\epsilon_i$  são geradas dentro de um intervalo  $W$ , chamado largura da desordem. O modelo em três dimensões apresenta uma transição metal-isolante quando um valor  $W_c$  é alcançado para a largura da desordem.

A solução do modelo envolve a obtenção dos auto-estados e auto-valores e algumas considerações são importantes para o entendimento do modelo. Podemos expandir a função de onda em termos de  $|i\rangle$ , ou seja,  $\psi = \sum_i c_i |i\rangle$ , ficamos então com a equação de Schrödinger ( $H\psi = E\psi$ ):

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (1.14)$$

Podemos fazer algumas simplificações a fim de entender melhor a natureza dos estados eletrônicos, sem no entanto descaracterizar o modelo de Anderson que tem por característica fundamental a presença dos potenciais aleatórios dados por  $\epsilon_i$ . Podemos considerar que os termos de hopping tem as mesmas magnitudes e existam somente para os  $z$  primeiros vizinhos, e a equação 1.14 torna-se:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=1}^z c_{i+j} \quad (1.15)$$

Para o caso puro todas as energias  $\epsilon$  seriam iguais (podendo ser inclusive zero por

comodidade), neste caso ficaríamos com:

$$Ec_i = t(c_{i+1} + c_{i-1}) \quad (1.16)$$

Escolhendo  $c_n = c_0 e^{ink}$ , a equação 1.16 fornece que  $E = 2t \cos(k)$ . Isto é termos uma banda de energia ( $-2t < E < 2t$ ) de largura  $B = 4t$  exatamente como discutido para o caso da Fig. 1.2, e como mostra claramente na Fig. 1.2. O modelo portanto abrange o caso puro e com desordem. Se o estado  $\psi$  é não estacionário, os coeficientes  $c_i$  obedecem a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{dc_i}{dt} = E_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (1.17)$$

Se em um instante  $t = 0$  em um determinado sítio  $n$  tivermos  $|c_n|^2 = 1$ , ou seja o elétron foi colocado no sítio  $n$ , com  $|c_{i \neq n}|^2 = 0$ . Podemos ver a evolução temporal através da equação 1.17. Depois de um certo tempo se tivermos ainda  $|c_n|^2 = 1$ , o estado está localizado. Se por outro lado depois de um certo tempo tivermos  $|c_n|^2 = 0$ , certamente o elétron se difundiu na rede e temos um estado estendido no sistema.

Anderson usou teoria de perturbação para estudar o problema com  $t \neq 0$  e  $W \neq 0$ . Como perturbação Anderson considerou em um momento  $W$  e em outro  $t$ . Considerando primeiramente  $t$  como a perturbação do sistema e os orbitais para cada sítio  $|i\rangle$  são os auto estados do Hamiltoniano não perturbado. A teoria de perturbação em primeira ordem fornece:

$$\Psi = |i\rangle + \sum_{j \neq i} c_{ij} |j\rangle. \quad (1.18)$$

As amplitudes  $c_{ij}$  são proporcionais a  $t/(E_i - E_j)$ . Os estados perturbados são somas de séries de potências de  $t/(E_i - E_j)$ . A largura de distribuição da desordem  $W$  deve conter as energias  $E_i$  e  $E_j$ . A condição de localização de Anderson é que  $W > B$ , onde  $B$  é a largura da banda permitida.

## 1.6 Teoria de escala para transição de Anderson

Anderson e outros autores apresentaram uma teoria de escala [15]. Nesta seção apresentaremos a teoria de escala na reformulação de Toulles [16]. No tratamento de Toulles a unidade básica não é mais apenas um sítio atômico  $i$  mas sim uma caixa de aresta  $L$  e volume  $L^d$  que contém muitos sítios. O sólido é formado por várias caixas acopladas e as energias características do modelo de Anderson  $W$  e  $B$  são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os sítios  $\Delta E$  e no deslocamento  $\delta E$  causado por mudanças nas condições de contorno. Nesta nova abordagem temos uma grandeza chamada condutância generalizada  $g$ , e é dada por :

$$\frac{\Delta E}{\delta E} \approx \frac{1}{g}. \quad (1.19)$$

A condutância é um parâmetro usado para medir o grau de desordem no sistema. Pelo princípio da incerteza pode-se estabelecer que :

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D}, \quad (1.20)$$

onde  $t_D$  aqui é o tempo para a função de onda se expandir por toda a rede de lado  $L$ . Se o elétron realiza um movimento Browniano dentro da caixa, podemos escrever que :

$$t_D = \frac{L^2}{D}. \quad (1.21)$$

Nesta última equação  $D$  é o coeficiente de difusão. Usando a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão:

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.22)$$

e combinando as Eq. 1.20-22 temos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (1.23)$$

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

$$n(E) = 1/(L^d \Delta E). \quad (1.24)$$

A condutância desempenha o papel de medir a força da desordem semelhantemente a razão  $W/B$  no modelo de Anderson tradicional. Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ( $\delta E > \Delta E$ ), enquanto que estados localizados não são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ( $\delta E < \Delta E$ ). O parâmetro de desordem,  $g^{-1}$  é definido por

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.25)$$

Substituindo as Eq. 1.23 e 1.24 na Eq. 1.25 podemos observar a dimensionalidade e a dependência de escala que o parâmetro  $g$  apresenta

$$g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2}. \quad (1.26)$$

Se a Eq. 1.23 é válida no limite macroscópico, a equação Eq. 1.26 é válida para estados estendidos no mesmo limite. A função  $g(L)$  é a condutância generalizada expressa em unidades de  $e^2/\hbar$ ,  $L^{d-2}\sigma$  é a condutância de um cubo de dimensão  $d$  e aresta  $L$ . Na teoria de escala o comportamento da função  $g(L)$  depende do comprimento de escala utilizado. Por exemplo, suponha que em uma dada circunstância a condutância depende de  $L_0$ , um novo valor de  $g(L)$  pode ser encontrado apenas pelo seu valor inicial  $g(L_0)$  e por um fator de escala  $b$ , onde  $L = L_0 b$ .

Para se obter o comportamento da condutância de um hipercubo de volume  $L^d$ , sua derivada logarítmica é introduzida, designada  $\beta$ , e expressa por :

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (1.27)$$

Esta grandeza depende basicamente da condutância e não da energia, desordem ou  $L$  separadamente.

Se tivermos que  $\beta > 0$  a condutância aumenta com o tamanho da amostra, temos assim um comportamento metálico. A região de comportamento metálico pode ser

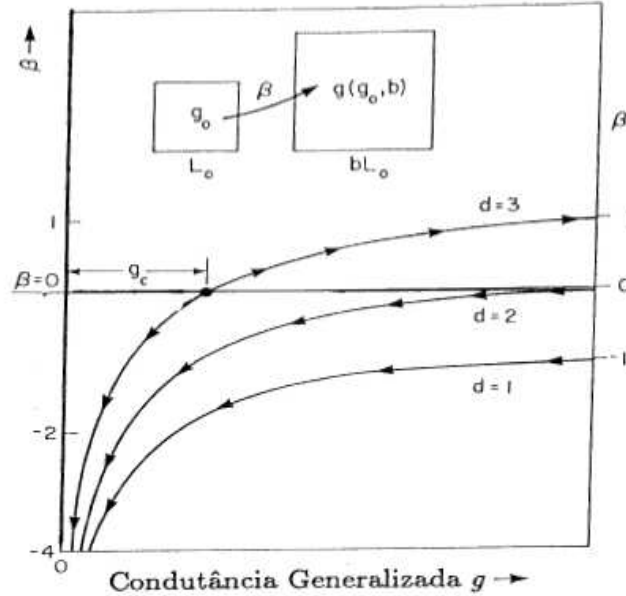


Figura 1.9: Comportamento da condutância generalizada  $g$

caracterizada por ter um comportamento clássico[13], isto é:

$$\beta(g) = d - 2, \quad (1.28)$$

(no limite  $g \rightarrow \infty$ ) a qual pode ser obtida de relações clássicas entre condutância e condutividade. Se por outro lado tivermos agora  $\beta < 0$ ,  $g(L)$  diminui com  $L$ , terminando num regime localizado onde:

$$\beta(g) = \ln g, \quad (1.29)$$

(no limite  $g \rightarrow 0$ ). Para  $g$  pequeno, com uma forte desordem, os estados são exponencialmente localizados. A amplitude da função de onda de um elétron localizado numa caixa de aresta  $L$  é da ordem de  $e^{-\gamma L}$ , onde  $\gamma$  é o expoente Lyapunov. Na figura Fig. 1.9 podemos ver o comportamento de  $\beta(g)$ . Um resultado notável é que em uma e duas dimensões não há a previsão para transição. Muitos experimentos reais têm tido boas concordâncias com os resultados numéricos.

Uma quantidade importante para caracterizar a transição de Anderson é o expo-

ente crítico  $\nu$  que descreve a divergência do comprimento de localização  $\xi$

$$\xi \propto |E - E_c|^{-\nu}. \quad (1.30)$$

A estimativa teórica de  $\nu$  pode ser comparada com a medida experimental do expoente da condutividade  $\mu$

$$\sigma(T = 0) \propto (E - E_c)^{-\mu}, \quad (1.31)$$

através da relação de Wegner  $\mu = (d - 2)\nu$ , onde  $d$  é a dimensionalidade do sistema e  $\sigma(T = 0)$  é condutividade a temperatura zero. Em três dimensões teremos claramente  $\mu = \nu$ , o que reforça a importância dos estudos numéricos.

A simetria do Hamiltoniano também influencia nos fenômenos críticos. Para a transição de Anderson com elétrons não interagentes as simetrias importantes são simetria de tempo reverso (STR) e simetria de rotação de spins (SRS). Estudos têm determinado o valor de  $\nu$  com precisão em cada classe de universalidade (ortogonal, unitária e simplética) que são agrupadas de acordo com as simetrias do Hamiltoniano. Se o sistema possui tanto STR quanto SRS a classe é dita como *ortogonal*. Se a STR é quebrada conservando a SRS a classe é dita como *unitária*. E por fim, se tivermos um sistema com STR mas com uma quebra da SRS por uma interação spin-órbita a classe é dita *simplética* [17, 18].

A obtenção numérica do expoente  $\nu$  para diferentes sistemas ajudam no estudo das propriedades eletrônicas e classificam os mesmos. Para a classe ortogonal têm-se encontrado  $\nu = 1.57 \pm 0.02$  [19], para a classe unitária  $\nu = 1.43 \pm 0.04$  [17] ambos em três dimensões. Para a classe simplética foi encontrado  $\nu = 2.746 \pm 0.009$ . A classe simplética tem sido de grande interesse depois da descoberta da transição metal-isolante em sistemas Si-MOS [20].

Existem muitos experimentos na literatura onde a transição metal-isolante vem sendo observada. Como bons exemplos podemos citar os realizados em silício dopado com fósforo e bário [13, 21, 22]. Nestes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. A força ou a largura da desordem pode ser modificada variando a concentração de dopantes ou através de um campo. Durante muitos anos foi sugerido a existência de dois tipos de materiais: não compensados com  $\nu = 0.5$  e semicondutores compensados e materiais amorfos com  $\nu = 1$  [22, 13]. Recentemente foi observado um expoente  $\nu = 1$  para o silício dopado com fósforo não compensado

$(S_i : P)$ [23]. Portanto não só a classificação do tipo de material como também o valor do expoente são questões abertas.

## 1.7 Violação da Teoria de Escala

Nesta seção vamos apresentar alguns trabalhos recentes nos quais a teoria de escala foi violada. Vamos separar em duas classes: sistemas aperiódicos e sistemas com desordem correlacionada. De uma forma geral, esses sistemas apresentam estados estendidos mesmo em baixa dimensionalidade. O novo ingrediente responsável por esta violação da teoria de escala é um potencial *on site* distinto do potencial completamente aleatório que foi utilizado até agora no modelo de Anderson.

### 1.7.1 Modelo aperiódico

Nos anos oitenta, Sarma[24] estudou um modelo unidimensional no qual a natureza dos auto estados estendidos e localizados era função de dois parâmetros  $\lambda$  e  $\nu$ . Para seu modelo, ele considerou uma forma de potencial para o qual o sistema seria um intermediário entre o modelo aleatório de Anderson e o modelo periódico de Bloch. Alguns trabalhos nesta linha podem ser encontrados nas referências [25, 26, 27]. No trabalho de Sarma o potencial era do tipo  $\epsilon_n = \lambda \cos(\pi \alpha n^\nu)$  onde  $\lambda$ ,  $\alpha$  e  $\nu$  são números positivos. Para  $\alpha$  racional e  $\nu$  inteiro o modelo retorna ao modelo periódico de Bloch, para  $\alpha$  irracional e  $\nu \geq 2$  o modelo de *tight binding* pseudo aleatório torna-se igual ao modelo de Anderson aleatório com todos os estados localizados. Para  $\alpha$  irracional e  $\nu = 1$  temos um problema de potencial incomensurável o qual pode ter estados estendidos e localizados. Para  $0 < \nu < 1$  e  $\lambda < 2$  temos estados estendidos para energias  $E$ , tais que  $|E| < 2 - \lambda$  e estados localizados para  $2 + \lambda > |E| > 2 - \lambda$ . Para  $\nu = 1$  todos os estados são localizados se  $\lambda > 2$  e todos são estendidos se  $\lambda < 2$ .

## 1.7.2 Modelos com desordem correlacionada

### *Correlações de curto alcance*

Um dos primeiros modelos unidimensionais com estados estendidos induzidos por correlações locais na desordem foi o "modelo de dímeros aleatórios" [28]. O modelo consiste de uma liga binária na qual as energias dos sítios do sistema  $\epsilon_a$  e  $\epsilon_b$  eram distribuídas com probabilidades respectivamente de  $q$  e  $1 - q$  e  $\epsilon_b$  sempre aparece em pares. Foi mostrado neste trabalho que, se  $|\epsilon_a - \epsilon_b| \leq 2t$ , onde  $t$  é a amplitude de hopping, o sistema apresenta um estado estendido de energia  $E = \epsilon_b$ . Estes tipos de modelos em uma dimensão podem servir para explicar o comportamento de materiais condutores como a polianilina [29].

### *Correlações de longo alcance*

No final da década de noventa, Moura e Lyra [14] mostraram que correlações de longo alcance podem estabilizar uma fase de estados estendidos em torno do centro da banda. Este trabalho mostrou pela primeira vez uma verdadeira fase metálica em sistemas unidimensionais desordenados. O modelo de Moura e Lyra consiste de um Hamiltoniano *tight binding* onde as energias *on site* foram distribuídas conforme o traço de um movimento Browniano fracionário. O traço de um movimento Browniano fracionário basicamente é uma sequência de números cujo o espectro de potência tem um comportamento tipo lei de potência ( $S(k) \propto 1/k^\alpha$ ). O expoente  $\alpha$  mede o grau de correlação da sequência. Para  $\alpha = 0$  recupera-se um ruído branco completamente descorrelacionado enquanto que em  $\alpha > 0$  obtem-se uma sequência de números com funções de auto correlação de longo alcance. Na natureza, vários processos estocásticos geram sequências aleatórias com correlações de longo alcance [30], daí a grande importância desta fenomenologia. De fato esta previsão teórica de estados estendidos em baixa dimensionalidade, induzidos por correlação de longo alcance tem motivado uma série de estudos teóricos/experimentais dentro deste contexto.

Um dos primeiros trabalhos que trazia uma generalização do trabalho de Moura e Lyra [14] (caso unidimensional) para um caso bidimensional, com correlações de longo alcance na distribuição da desordem, foi o trabalho de Xiong [31]. Os autores deste trabalho consideraram o sistema num plano  $x - y$ , numa geometria quase unidimensional. O sistema era como uma longa faixa onde a direção  $y$  era muito maior que a direção  $x$ . O estudo de sistemas quase unidimensionais foi de grande interesse nos anos oitenta [13] pois possibilitaram o cálculo do comprimento de localização dos auto estados e uma extrapolação para uma geometria verdadeiramente de duas dimensões. Esta extrapolação



é feita através de uma análise de tamanhos finitos [13]. As correlações de longo alcance, para este modelo, foram introduzidas na direção maior, através da seguinte superposição, que considera que as energias aleatórias dos sítios consiste de duas partes:

$$\epsilon_{im} = \eta_m + \nu_{im}, \quad (1.32)$$

onde  $\nu_{im}$  são números aleatórios que variam independentemente sítio a sítio, obedecendo a uma distribuição uniforme e são escolhidos num intervalo determinado. O termo dado por  $\eta$  é uma sequência de energias correlacionadas definidas pelo traço do movimento Browniano fracionário.

Para calcular o comprimento de localização Xiong e colaboradores, usaram o método da matriz de transferência bidimensional. Neste trabalho foi encontrada uma transição metal-isolante do tipo Kosterlitz-Thouless. Uma característica deste tipo de transição, é que o comprimento de localização  $\lambda$  diverge exponencialmente numa forma  $\lambda_\infty \propto \exp(\theta_0/\sqrt{E - E_c})$ . A distribuição da desordem tem densidade espectral tipo lei de potência  $S(k) \propto 1/k^\alpha$ ,  $k$  é o vetor de onda na direção  $y$ .

A referência [32] traz um estudo do modelo de Anderson numa rede bidimensional, na qual as correlações são introduzidas nas duas direções  $x$  e  $y$ . Para introduzir as correlações de longo alcance neste sistema foi aplicado um método de transformada de Fourier em duas dimensões para construir uma sequência de energias de densidade espectral  $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2d}}$ , onde  $k = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ . Este trabalho traz um estudo estático e dinâmico do modelo de Anderson. Na parte estática os autores usaram o método de diagonalização exata para investigar a função de participação (grandeza que dá uma medida de quantos sítios participam da função de onda). O estudo da participação reportou a existência de estados estendidos no regime de baixas energias para  $\alpha_{2d} > 2$ . Já no caso dinâmico os autores usaram o método de Runge-Kutta para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo para um pacote de onda inicialmente localizado. Na parte dinâmica uma análise do desvio médio quadrático  $\sigma$ , mostrou que o sistema apresenta regimes diferentes de acordo com o parâmetro  $\alpha_{2d}$ . Para correlações fracas ( $\alpha_{2d} < 2$ ) um comportamento difusivo foi encontrado com  $\sigma^2 \propto t$ . Já para correlações fortes ( $\alpha_{2d} > 2$ ) o sistema apresenta uma dinâmica balística com  $\sigma^2 \propto t^2$ .

Estes trabalhos têm mostrado que a presença de desordem correlacionada tem influência sobre as propriedades eletrônicas do sistema de dimensões  $d < 3$ , de forma a violar a teoria de escala.

---

Nos capítulos seguintes mostraremos o modelo de Anderson com correlações de longo alcance na distribuição da desordem. A distribuição da desordem é feita de forma a ter uma densidade espectral do tipo  $S(k) \propto 1/k^\alpha$ . No capítulo dois estudaremos o modelo de Anderson unidimensional nos casos estático e dinâmico. Por meio da análise da função de participação e do desvio médio quadrático poderemos identificar regimes, onde a teoria de escala é violada no problema unidimensional. No capítulo três, mostraremos o caso bidimensional, que trará um estudo das flutuações da participação, que será usada para monitorar a energia crítica. Mostraremos ainda um diagrama de fases completo com regiões de estados localizados, críticos e estendidos.

## Capítulo 2

# Modelo de Anderson Unidimensional com Correlações de Longo Alcance

No capítulo anterior, mostramos a importância da desordem diagonal no modelo de Anderson bem como suas consequências sobre a natureza dos estados eletrônicos. Mostramos também alguns casos, onde correlações na distribuição de desordem induzem uma transição metal isolante mesmo em uma dimensão. Estes modelos continuam recebendo bastante atenção da comunidade científica [14, 33, 34] e suas propriedades físicas merecem uma investigação mais profunda em todos os limites de existência dos modelos. Neste capítulo, vamos considerar o modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo alcance na distribuição das energias dos sítios. Para introduzir correlações na desordem vamos considerar uma sequência que apresenta uma densidade espectral aproximadamente na forma de uma lei de potência  $S(k) = 1/k^\alpha$ . A função  $S(k)$  é obtida fazendo a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ , com  $k$  sendo o vetor de onda. Este modelo é o mesmo que foi proposto na referência [14]. Em nosso estudo vamos aplicar um formalismo numérico de diagonalização exata bem como solução da equação de Schrödinger para caracterizar a natureza dos estados eletrônicos no regime de correlações fracas ( $\alpha < 2$ ). Vamos inicialmente descrever de forma sucinta como gerar o potencial correlacionado.

## 2.1 Correlações de longo alcance

A função  $S(k)$  é obtida fazendo a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ , com  $k$  sendo o vetor de onda. Em geral sistemas que tendem a evoluir para estados críticos autorganizáveis geram sequências com correlações de longo alcance [35]. Os nucleotídeos da molécula de DNA [36, 35] por exemplo, apresentam uma sequência com ruído do tipo  $S(k) = 1/k^\alpha$ .

Mandelbrot [37, 38] introduziu o conceito de movimento Browniano fracionário (MBF) como uma generalização de uma função aleatória  $x(t)$ . Este conceito tem sido usado para gerar sequências aleatórias com correlações de longo alcance [31]. Este movimento possui algumas características particulares.

Para um movimento Browniano fracionário, a função

$$C(t) = \left[ \frac{\langle -B_H(-t)B_H(t) \rangle}{B_H(t)^2} \right] = (2^{2H-1} - 1), \quad (2.1)$$

mede a correlação entre os incrementos no futuro ( $B_H(t)$ ) e os incrementos no passado ( $-B_H(-t)$ ). Na equação acima,  $H$  é o expoente de Hurst,  $B_H(t)$  é a posição num instante  $t$  de uma partícula que descreve um movimento Browniano. Se tivermos  $H = 1/2$  não teremos correlação entre incrementos passados e futuros ou seja, um movimento Browniano simples. Entretanto, se tivermos  $H \neq 1/2$ , a função de correlação é diferente de zero para qualquer instante de tempo. Neste caso teremos movimento Browniano fracionário, podendo o mesmo ser: *persistente* com  $H > 1/2$  (os incrementos futuros aumentam ou diminuem, concordando com os incrementos passados), ou *antipersistente* com  $H < 1/2$  (os incrementos futuros aumentam ou diminuem, sempre em oposição ao que aconteceu nos incrementos anteriores).

Para gerar uma série temporal aleatória com espectro bem definido, a literatura sugere o uso de transformada de Fourier discreta [39, 40, 41, 42]. Supondo que a posição da partícula foi observada nos instantes  $t_i = i\tau$  e que tenha  $N$  valores num período  $T = N\tau$ , a densidade espectral tipo lei de potência é imposta pela equação:

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(\omega_k) \Delta\omega)^{1/2} \cos(\omega_k t_n + \phi_k), \quad (2.2)$$

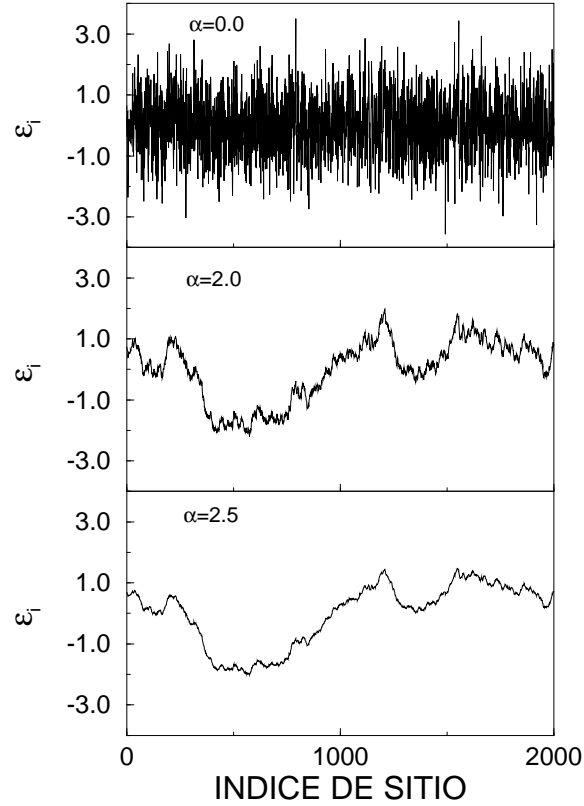


Figura 2.1: Sequências geradas pela Eq. 2.5 com  $N = 2000$  e: a)  $\alpha = 0.0$  (sequência aleatória sem correlações b)  $\alpha = 2.0$  um movimento Browniano simples; c)  $\alpha = 2.5$  (traço de um movimento Browniano fracionário com incrementos persistentes).

que é a decomposição discreta de Fourier para a sequência  $x_i(t)$ . Teremos  $N/2$  fases aleatórias  $\phi$ , que representam a fonte de ruído da série, uniformemente distribuídas no intervalo  $[0, 2\pi]$ . A equação 2.2 pode ser reescrita como:

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\alpha} \left( \frac{2\pi}{N} \right)^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi nk}{N} + \phi_k \right). \quad (2.3)$$

Baseados nestes conceitos, vamos gerar uma sequência de energias, de forma aleatória, mas com correlações. Observaremos entre outros detalhes que o parâmetro  $\alpha$  controla a correlação no sistema. Se  $\alpha = 0$  teremos uma sequência aleatória sem correlações ou seja,

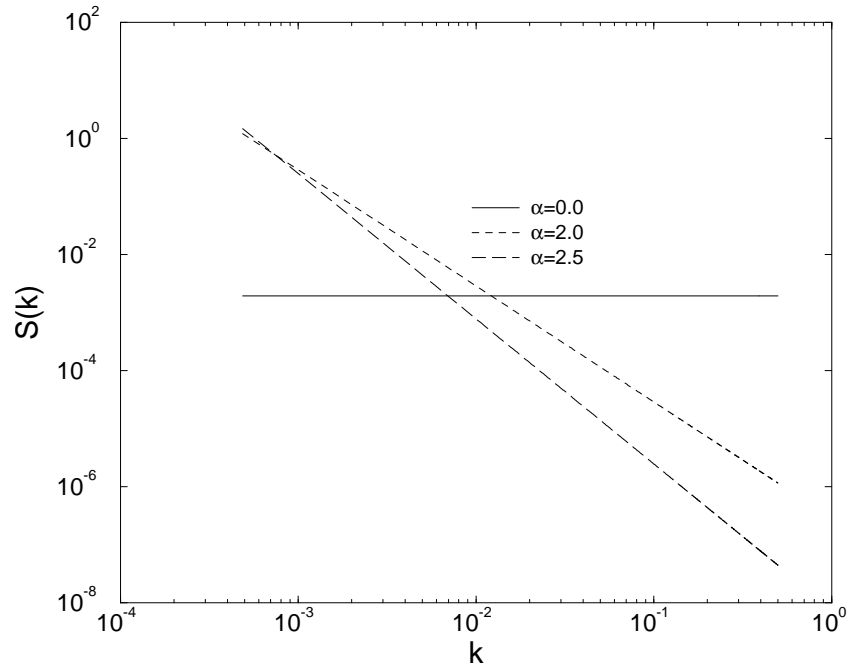


Figura 2.2: A transformada de Fourier da Eq. 2.5, obtida computacionalmente. Podemos facilmente observar que o espectro apresenta um comportamento tipo lei de potência ( $S(k) \propto 1/k^\alpha$ ) sem ruído nas amplitudes.

um ruído branco.

## 2.2 O Modelo

O modelo de Anderson unidimensional descreve o comportamento de um sistema numa rede com um elétron. A rede é constituída por um átomo em cada sítio, e cada átomo possui um orbital apenas. O modelo considera ainda a interação entre primeiros vizinhos. A Hamiltoniana para o modelo é dada por :

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + t \sum_n [|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|]. \quad (2.4)$$

A base  $|n\rangle$  representa o estado do elétron num orbital de um sítio  $n$ , já que cada sítio tem apenas um orbital. O potencial é dado por  $\epsilon_n$  em cada sítio  $n$ , e  $t$  representa a

amplitude de hopping.

A introdução das correlações de longo alcance na distribuição da desordem está na forma de gerar os potenciais  $\epsilon_n$ , através do traço de um movimento Browniano fracionário já comentado anteriormente,

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

Um gráfico de  $\epsilon_n \times n$  é mostrado na figura Fig. 2.1 para  $\alpha = 0$  (ruído branco),  $\alpha = 2$  (movimento Browniano simples),  $\alpha = 2.5$  (movimento Browniano fracionário).

A densidade espectral ( $S(k) \propto 1/k^\alpha$ ), para  $\alpha = 0$ ,  $\alpha = 2$  e  $\alpha = 2.5$  é mostrada na figura Fig. 2.2. A densidade espectral apresenta um comportamento típico de uma lei de potência bem definida, em contraste com as sequências reais que apresentam um comportamento tipo lei de potência com ruído nas amplitudes. A sequência das energias é normalizada de modo que a variância na distribuição das energias seja  $\Delta\epsilon = \sqrt{\langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2} = \text{constante}$ , essa preferencialmente escolhida como sendo igual a um. Em nosso estudo do modelo de Anderson unidimensional, analisamos dois casos distintos: dinâmico e estático, que envolve a solução da equação de Schrödinger para o caso dependente e não dependente do tempo respectivamente. Descreveremos o procedimento usado para atacar o problema para os dois casos, ao mesmo tempo em que mostraremos os resultados obtidos.

### *Caso Estático*

Para estudar a natureza dos estados eletrônicos do sistema, o primeiro passo é diagonalizar o Hamiltoniano da Eq. 2.4. Se  $|\Psi\rangle$  é auto-estado do Hamiltoniano com auto-energia  $E$  e se tivermos

$$|\Psi\rangle = \sum_n u_n |n\rangle, \quad (2.6)$$

então, para a equação de Schrödinger  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  na base  $|n\rangle$ , ficamos com a expressão

$$\epsilon_n u_n + t(u_{n-1} + u_{n+1}) = E u_n. \quad (2.7)$$





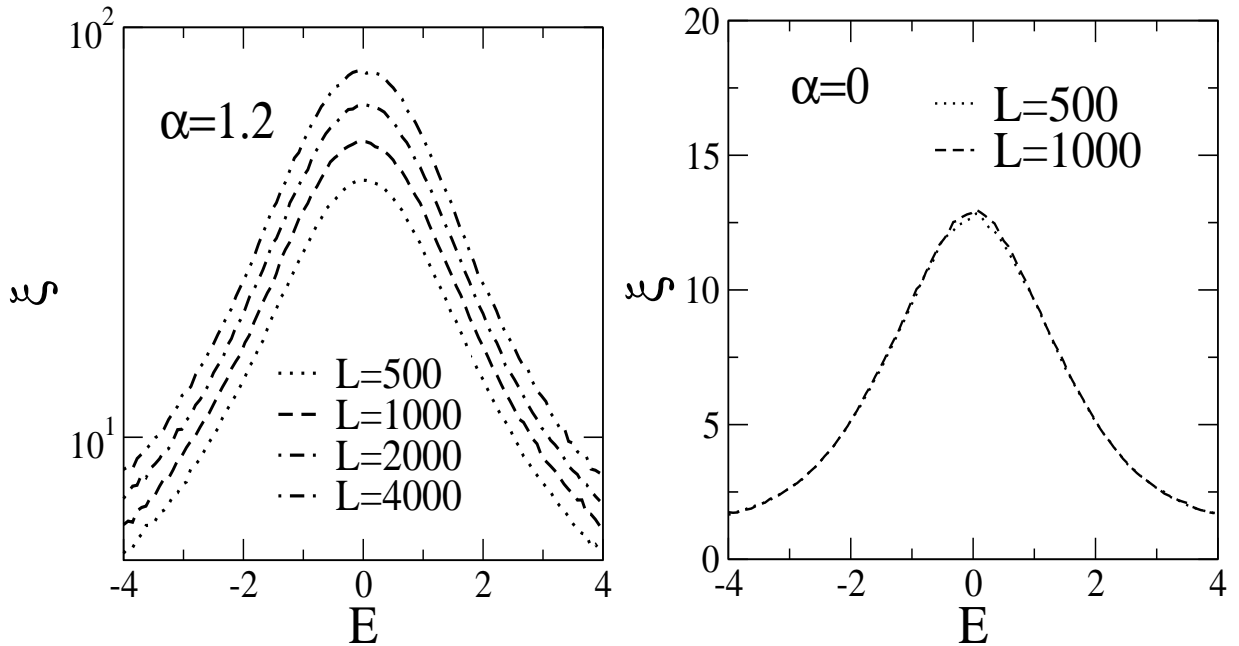


Figura 2.3: Função de participação em função de  $E$  para tamanhos diferentes de rede  $L$  e,  $\alpha = 1.2$  e  $\alpha = 0$ . A dependência da participação com o tamanho do sistema mostra um comportamento não usual no modelo de Anderson. Para  $\alpha = 0$ , a participação independe do tamanho da rede.

Logo, temos que  $\xi$  expressa o número de sítios onde a função de onda é diferente de zero. Vamos discutir agora como a função participação depende do grau de correlação na distribuição de desordem.

O gráfico da figura Fig. 2.3 mostra a função participação versus energia para  $\alpha = 1.2$  e  $\alpha = 0$ . Podemos observar um comportamento anômalo deste sistema unidimensional na presença de correlações de longo alcance fracas. Vemos no gráfico que, à medida que o tamanho da rede é aumentado, o número de sítios que participam da função de onda também aumenta. Este comportamento é totalmente diferente do comportamento esperado para estados localizados onde a função participação é independente do tamanho da cadeia  $L$ .

O colapso dos dados para a função de participação, nos gráficos de  $\xi/L^{D_2}$  em função de  $E$ , sugere que a função obedece a uma escala tipo lei de potência. Para cada intensidade

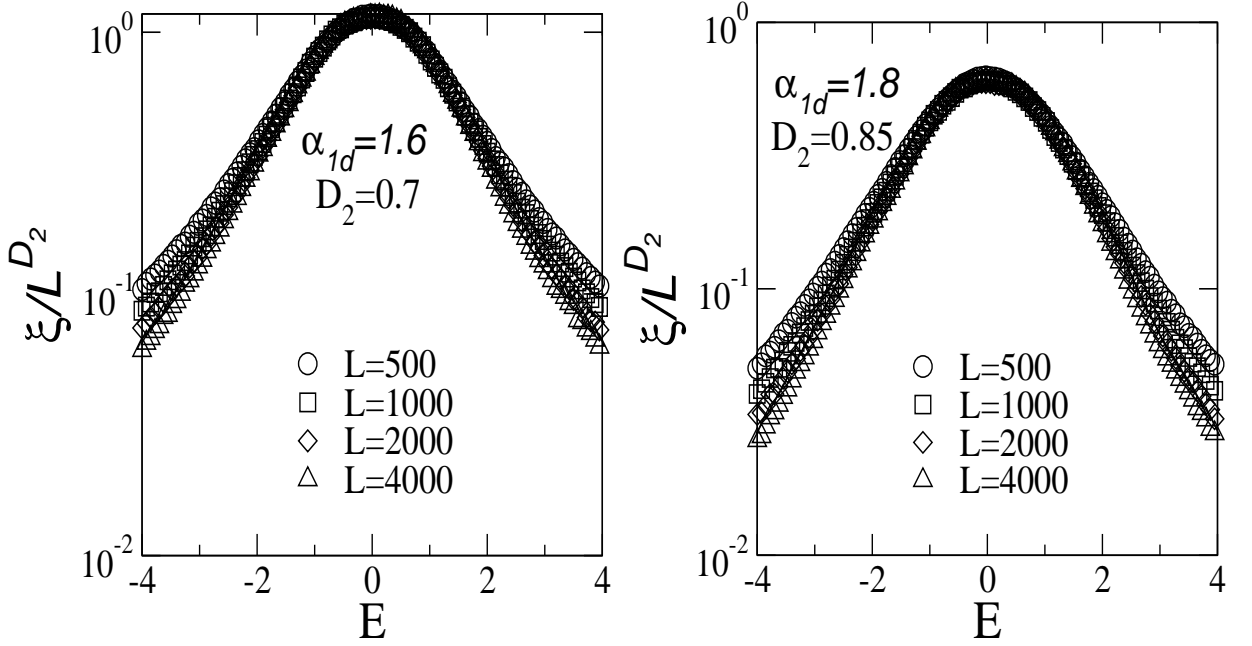


Figura 2.4: Escala da participação,  $\xi/L^{D_2}$  vs.  $E$ , para  $\alpha = 1.6$  e para  $\alpha = 1.8$ . Mesmo num regime de correlações fracas, a participação apresenta um comportamento de escala anômalo.

da correlação  $\alpha$ , temos um valor diferente para o expoente  $D_2$ .

A Fig. 2.4 mostra o gráfico  $\xi/L^{D_2} \times E$ , onde podemos ver que, no centro da banda, os dados para diferentes tamanhos de rede apresentam uma escala anômala, mesmo num regime de correlações fracas e estados localizados. Este tipo de comportamento anômalo com  $D_2 < d$  já foi observado antes[43].

Na Fig. 2.5 são mostrados dois gráficos no regime de fortes correlações. O colapso dos dados de redes com tamanhos diferentes é observado no centro da banda. Este comportamento sugere a existência de estados estendidos, com o expoente  $D_2$  tendendo a unidade.

O gráfico da figura Fig. 2.6 mostra  $D_2 \times \alpha$ . Este gráfico mostra a existência de dois transientes. Um deles está na a região  $\alpha < 1$ , onde vemos claramente  $D_2$  tender a zero. Esta é uma região de correlações fracas e estados localizados. A outra região que apresenta um transiente é a região  $\alpha > 2$ , onde vemos desta vez que o valor de  $D_2$  tende a um. Já foi visto que quando o expoente  $D_2$  tende ao valor da dimensão do sistema,

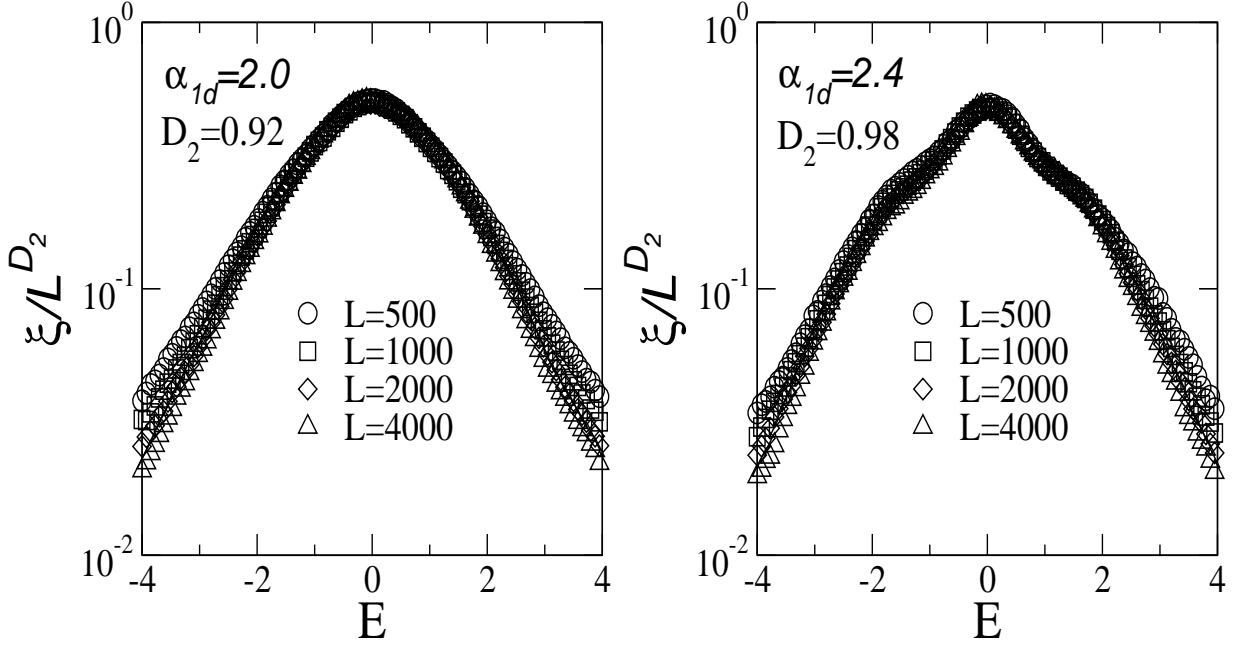


Figura 2.5: Escala da participação,  $\xi/L^{D_2}$  vs.  $E$ , para  $\alpha = 2.0$  e para  $\alpha = 2.4$ . No regime de fortes correlações e estados estendidos um colapso dos dados é observado para baixas energias.

estamos numa região de estados estendidos[32].

A região compreendida entre  $1 < \alpha < 2$ , mostra um crescimento linear do expoente que governa o colapso da participação com  $\alpha$ . Três regimes podem ser identificados a partir desse estudo. Um regime para  $\alpha < 1$ , onde os estados estão localizados e a participação é praticamente independente do tamanho da rede  $L$ . Um outro regime pode ser visto para  $1 < \alpha < 2$ , onde embora os estados sejam localizados a participação apresenta uma escala anômala  $\xi \propto L^{D_2}$ . Finalmente, um regime para  $\alpha > 2$ , para o qual teríamos estados estendidos.

### *Caso Dinâmico*

Para o caso dinâmico temos que resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo.

$$H|\psi(t)\rangle = i\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}, \quad (2.11)$$

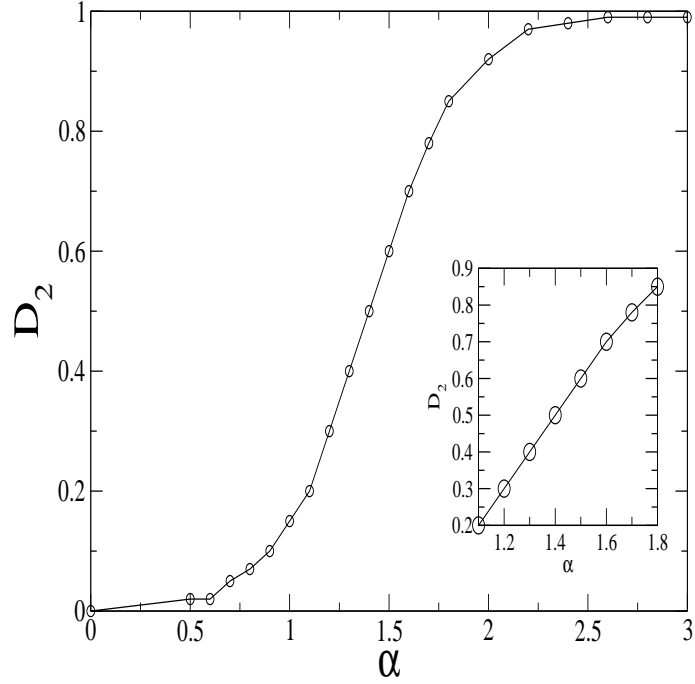


Figura 2.6: Gráfico de  $D_2 \times \alpha$ . Três regimes distintos podem ser observados no gráfico: um de estados localizados para  $\alpha < 1$ , um de estados estendidos para  $\alpha > 2$  e um regime de estados localizados mas com um comportamento não usual para  $1 < \alpha < 2$

expandindo o estado quântico do sistema na base de Wannier  $|\psi\rangle = \sum_n u_n |n\rangle$ , a equação de Schrödinger é dada por:

$$i\hbar \frac{du_n}{dt} = \epsilon_n u_n(t) + t[u_{n+1}(t) + u_{n-1}(t)], n = 1, 2, \dots, N. \quad (2.12)$$

Para encontrar as componentes  $u_n$  dos auto-estados, vamos evitar os métodos usuais de solucionar as equações diferenciais. Vamos formalmente obter o operador de evolução temporal  $U$

$$U = \exp(-itH/\hbar), \quad (2.13)$$

apenas integrando a equação 2.11 e aplicar uma expansão de Taylor da exponencial (fa-

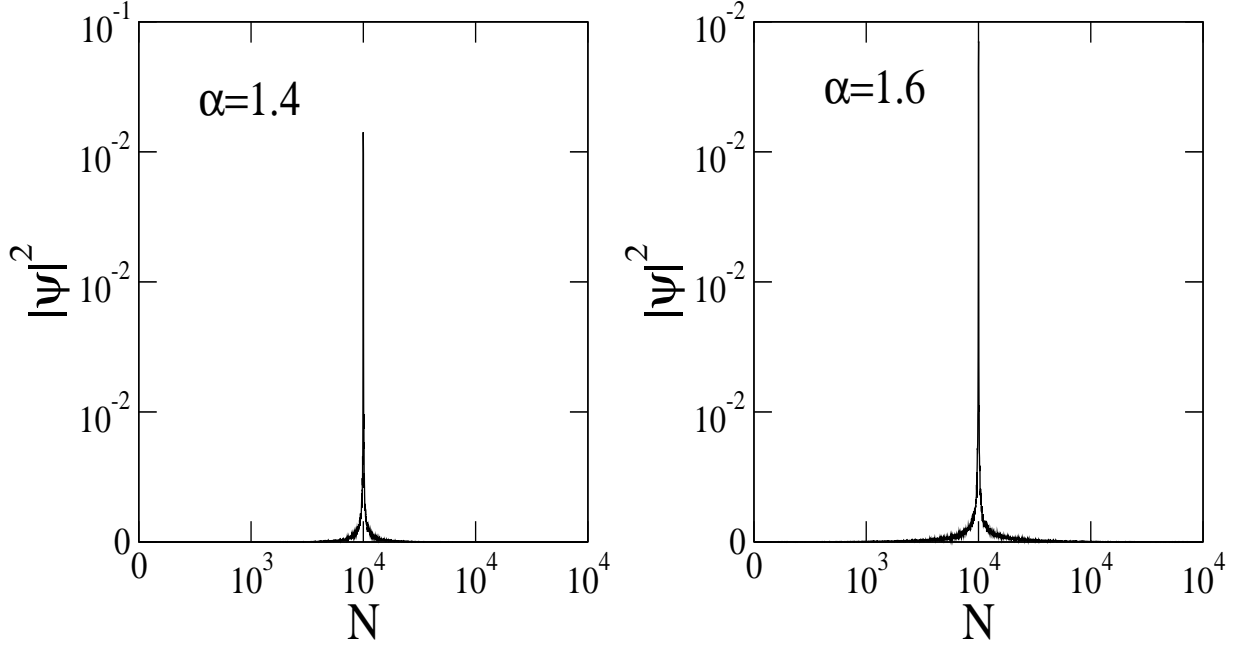


Figura 2.7: Densidade de probabilidade da função de onda  $|\Psi|^2$ , em função dos  $N$  sítios da rede, para  $\alpha = 1.4$  e  $\alpha = 1.6$ . No regime de correlações fracas, os estados são localizados e a função de onda fica restrita a uma região

zendo  $t=dt$  e  $\hbar = 1$ )

$$U = 1 + \sum_{g=1}^l (-idtH)^g/g!. \quad (2.14)$$

Dada uma condição inicial  $|\psi(t_0)\rangle$  podemos encontrar  $|\psi(t_0 + dt)\rangle$  aplicando de forma recursiva o operador  $U$  devidamente expandido.

Para analisar a natureza dos estados eletrônicos, calculamos o desvio médio quadrático  $\sigma^2(t)$ . Essa grandeza é uma medida do alargamento do pacote eletrônico, e é dada pela equação:

$$\sigma^2(t) = \sum_{i=1}^N (i - m)^2 |u_i(t)|^2, \quad (2.15)$$

se esta grandeza cresce, indica que a função de onda está se difundindo na rede. Para estados estendidos, ou seja, quando o material se torna um condutor perfeito, a grandeza  $\sigma$  traduz este efeito exibindo uma dinâmica balística  $\sigma \propto t$ . Isso quer dizer basicamente

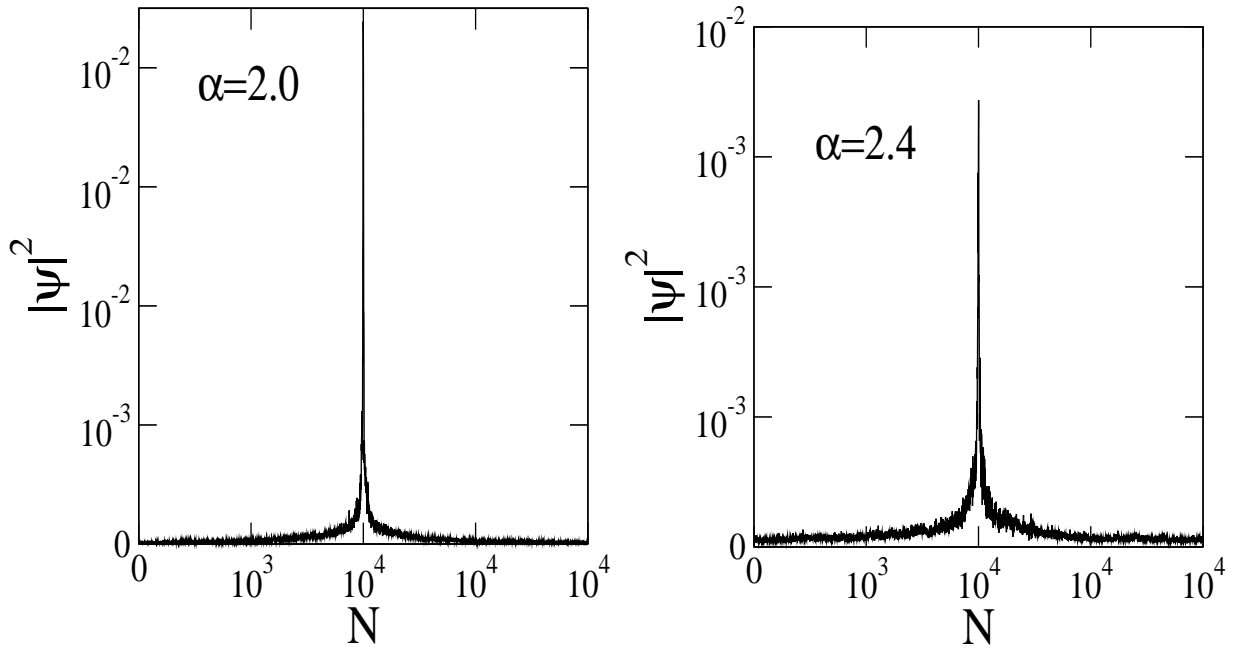


Figura 2.8: Densidade de probabilidade da função de onda  $|\Psi|^2$ , em função dos  $N$  sítios da rede, para  $\alpha = 2.0$  e  $\alpha = 2.4$ . No regime de correlações fortes, os estados são estendidos e a função de onda está presente no sistema inteiro.

que o pacote de onda se difunde sem perceber a desordem na rede.

Uma análise inicial da função de onda nos fornece uma idéia da dependência dos estados eletrônicos com a correlação. Os gráficos seguintes mostram o comportamento do módulo quadrado da função de onda em função dos sítios da rede  $N$ .

Para os gráficos da Fig. 2.7, vemos que a densidade de probabilidade da função de onda fica restrita a uma região do sistema, comportamento típico de estados localizados. Isso se deve a um regime de correlações fracas imposto ao sistema pelo parâmetro  $\alpha$ . Já para o gráfico da Fig. 2.8, o comportamento é bem diferente. Os gráficos mostram que existe a probabilidade de encontrarmos o elétron em qualquer sítio da rede. Observamos dessa forma a sensibilidade da função de onda com o grau de correlação do sistema.

A função  $\sigma$  anteriormente definida, mostra que existe um regime de espalhamento balístico, para um grau de correlação forte ( $\alpha = 3$ ) com  $\sigma \propto t$ . Para correlações fracas a função  $\sigma$  apresenta um colapso para tempos longos governado por um expoente, o que traduz a existência de um regime de estados localizados mas com um comportamento

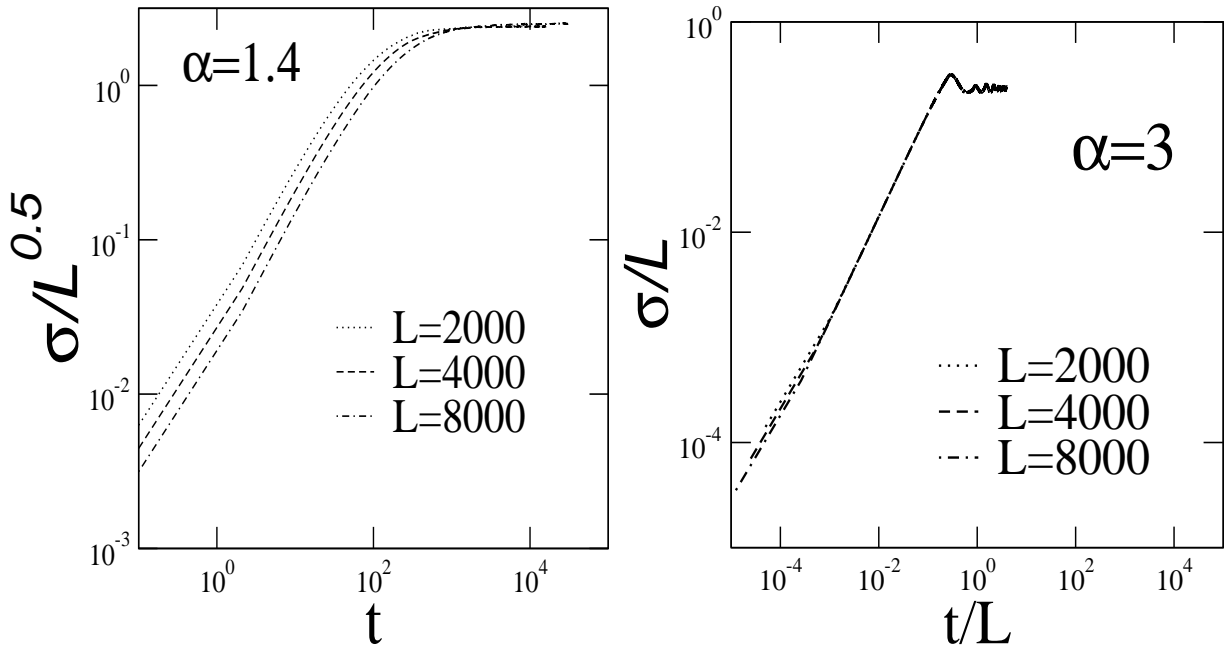


Figura 2.9: Comportamento de  $\sigma$  para intensidades de correlações diferentes. Para correlações fortes  $\alpha = 3.0$ ,  $\sigma$  apresenta um comportamento balístico enquanto que para correlações fracas  $\alpha = 1.6$ , não há um perfeito colapso dos dados

diferente. Ambos os casos são mostrados nos gráficos da figura Fig. 2.9.

O expoente que governa o colapso dos dados do desvio médio quadrático pode ser encontrado por meio da análise da função de onda. A função de onda para correlações fracas apresenta inicialmente um comportamento que pode ser ajustado por uma lei de potência, para depois apresentar um decaimento exponencial, de modo que a curva da função de onda pode ser ajustada por  $|u_n|^2 \sim n^{-\gamma} \exp(-n/l_c)$ . O gráfico Fig. 2.10(a) mostra a função de onda versus  $n$  (o número de sítios) para  $\alpha = 1.4$ , bem como a curva que foi ajustado ao gráfico da função de onda (curva tracejada).

A largura da curva exponencial que é ajustada ao decaimento da função de onda é então calculada para cada tamanho de rede, essa largura é dada por  $l_c$ . O ajuste tipo lei de potência do gráfico de  $l_c \times L$  fornece aproximadamente o expoente que colapsa os dados de  $\sigma$  com correlações fracas. O gráfico da figura Fig. 2.10(b) mostra a curva com a qual obtemos a dependência de  $l_c$  com o tamanho da rede. O expoente de  $L$ , dessa dependência ( $l_c \sim L^{0.48}$ ) é aproximadamente igual ao valor do expoente de  $L$ , no gráfico

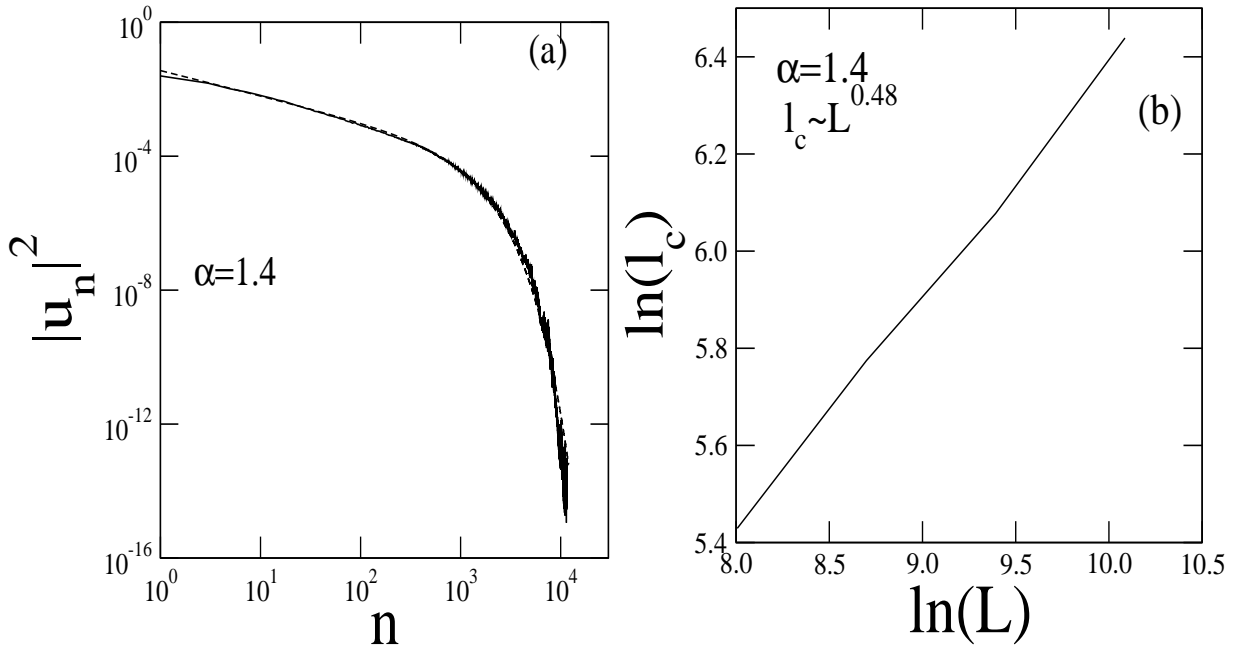


Figura 2.10: (a) Função de onda versus  $n$ . A função de onda apresenta um comportamento tipo lei de potência para uma região e depois apresenta um decaimento exponencial. A curva pode ser ajustada por uma curva que contenha os dois comportamentos  $|u_n|^2 \sim n^{-\gamma} \exp(-n/l_c)$ , curva tracejada. (b) Gráfico de  $\ln(l_c) \times \ln(L)$ . A lei de potência que fita este gráfico fornece exatamente o expoente que colapsa dos dados de  $\sigma$  em correlações fracas.

da Fig. 2.9 ( $\sigma \sim L^{0.5}$ ), para o caso de  $\alpha = 1.4$ . Este fato sugere uma explicação para o fato de que, mesmo em um regime de baixas correlações  $\sigma$  ainda continua tendo um espalhamento proporcional a  $L$  elevado a um expoente, uma vez que a forma com a qual a função de onda decai depende do tamanho  $L$  elevado ao mesmo expoente relacionado ao espalhamento de  $\sigma$ . Para cada valor de  $L$  encontramos um expoente  $\gamma$ , que no caso da Fig. 2.10 com  $L = 16000$ ,  $\gamma = 0.6$ .

Em resumo, neste capítulo estudamos o modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo alcance para o caso estático e dinâmico. Este estudo mostrou uma violação da teoria de escala em ambos os casos. No caso estático, utilizando o método de diagonalização exata, calculamos a função de participação, cujo colapso dos dados no regime de correlações fortes apontam a existência de estados estendidos. No caso dinâmico por meio da solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, encontramos um



---

regime de espalhamento balístico pela análise da grandeza  $\sigma$ . Vimos ainda que em correlações fracas um colapso dos dados é governado por um expoente que pode ser encontrado a partir do comportamento da função de onda. Encontramos que este expoente depende continuamente do grau de correlação na desordem. Expoentes críticos que dependem continuamente do expoente da função de correlação da desordem são previstos pelo critério de Harris estendido aplicado a sistemas onde correlações de longo-alcance na desordem são relevantes[44]. Voltaremos a discutir essa fenomenologia no capítulo seguinte quando estudaremos o comportamento crítico do modelo de Anderson com desordem correlacionada em duas dimensões.

## Capítulo 3

# Modelo de Anderson com Correlações de Longo Alcance em Duas Dimensões

Neste capítulo mostraremos o modelo de Anderson em duas dimensões com correlações de longo alcance na distribuição da desordem. As correlações de longo alcance são introduzidas por meio de uma transformada de Fourier discreta em duas dimensões, que gera uma sequência de energias com densidade espectral que obedece a uma lei de potência bem definida. Nós usaremos a invariância de escala da flutuação relativa da função de participação para encontrar a *mobility edges*. Encontramos que os estados tornam-se deslocalizados de acordo com o grau de correlação do sistema, e que o expoente crítico  $\nu$  depende do grau de correlação.

### 3.1 Introdução

A ocorrência de uma transição de estados localizados para estados deslocalizados num sistema com correlações fracas e geometria tridimensional, e a ausência desta transição em sistemas de baixa dimensionalidade com simetria de tempo reverso e qualquer intensidade de desordem, foram previsões aceitas durante muitos anos. Dentro da teoria de localização, a característica quantitativa mais importante da transição de Anderson é o expoente crítico  $\nu$  que descreve a divergência do comprimento de localização

$\xi_\infty \propto |E - E_c|^{-\nu}$ , onde  $E$  indica a energia de Fermi e  $E_c$  os *mobility edges* que separam estados localizados de estados estendidos. Embora o modelo de Anderson tenha sido estudado intensamente nas últimas décadas, apenas recentemente estimativas precisas do expoente  $\nu$  foram fornecidas. No capítulo (1) mostramos estas estimativas para as classes ortogonal, unitária e simplética. Usando a relação proposta por Wegner é possível obter o expoente  $\mu$  para a condutividade, a temperatura zero, por meio do expoente  $\nu$  ( $\mu = \nu$  para sistemas 3D). Portanto o expoente crítico  $\nu$  pode ser usado como ferramenta para estudar o mecanismo da transição metal-isolante em semicondutores dopados e materiais amorfos.

Em baixas dimensões a classe ortogonal não exibe uma transição localização-deslocalização. No entanto sistemas com outras simetrias apresentam tal transição. Por exemplo, na presença de um campo magnético forte e perpendicular, sistemas desordenados  $2d$  exibem estados deslocalizados no centro da banda de Landau, efeito conhecido como transição Hall quântica[45]. Usando o método da função de Green, o valor para o expoente crítico foi calculado com o valor  $\nu = 2.35(3)$ , concordando com o resultado experimental [45]. Outro caso interessante em que ocorre fase metálica em duas dimensões é nos sistemas com simetria simplética, onde a simetria de tempo reverso é preservada mas a simetria de rotação de spin é quebrada por uma interação spin-órbita. Os autores da referência [18], usando o método da matriz de transferência, encontram um expoente crítico de valor  $\nu = 2.746(9)$ . A classe simplética tem despertado grande interesse depois da descoberta da transição metal isolante em sistemas Si-MOS(*metal-oxide-semiconductor*)

A classe ortogonal em geometrias de baixa dimensionalidade pode suportar estados estendidos ou uma transição localização-deslocalização na presença de correlações de curto ou de longo alcance na distribuição da desordem[28, 46, 14, 47, 48, 49, 50], bem como nos acoplamentos [51, 52, 53, 54]. A ausência da localização de Anderson para algumas energias específicas foi proposta para esclarecer as propriedades de transporte em semicondutores com correlações de curto alcance na desordem[55]. No entanto, muitos trabalhos têm dado atenção ao problema unidimensional com correlações de longo alcance na desordem, e trabalhos de muitos autores têm reportado que estes sistemas exibem uma transição metal-isolante com *mobility edges* separando estados estendidos de estados localizados para correlações suficientemente fortes[14, 56, 57, 58]. Recentemente o comportamento crítico do modelo de Anderson em três dimensões foi objeto de uma investigação detalhada[59]. Foi encontrado que para correlações fracas o expoente do comprimento de localização permanece como em um sistema descorrelacionado. No regime de correlações fortes este

expoente se torna dependente da correlação, em concordância com o critério estendido de Harris[44].

O critério estendido de Harris assegura que correlações de longo alcance presentes na distribuição na desordem, que caem conforme uma lei de potência da posição  $r$  ( $1/r^\gamma$ ), serão irrelevantes para o comportamento crítico se o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu_0$  da transição que ocorre na ausência de correlações satisfizer uma das seguintes desigualdades:  $\nu_0 > 2/d$  para correlações fracas com  $\gamma > d$ , ou  $\nu_0 > 2/\gamma$  com  $\gamma < d$ , onde  $d$  é a dimensão do sistema. Do contrário as correlações tornam-se relevantes e o comprimento de correlação assume um valor não universal dado por  $\nu = 2/\gamma$ . O critério de Harris foi desenvolvido para sistemas que apresentam transição de fase de segunda ordem na presença de desordem não correlacionada. Portanto ele não pode ser aplicado diretamente aos sistemas que apresentam uma transição induzida por correlação.

Usando a hipótese de que o comprimento de localização normalizado obedece a um único parâmetro de escala perto da transição induzida por correlações no modelo de Anderson unidimensional, os autores da referência [58] calcularam o expoente crítico do comprimento de correlação e encontraram que ele dependia do grau de correlação.

A abordagem em duas dimensões do modelo de Anderson teve início com o trabalho de Xiong[31]. Mais recentemente, os efeitos de correlações de longo alcance na distribuição da desordem em sistemas bidimensionais introduzidas em ambas as direções  $x$  e  $y$  foram estudados nas referências [32, 60] (ver comentários no capítulo 1). Os resultados destes trabalhos mostraram boa concordância com os resultados obtidos analiticamente na referência [61], que prevê uma violação da teoria de escala.

Durante o tempo em que a teoria de escala foi desenvolvida, técnicas experimentais tornaram-se capazes de testarem resultados teóricos. No regime metálico por exemplo, a teoria de correlação fraca prevê uma correção para a condutividade no regime de baixa temperatura, para sistemas em duas dimensões. Esta teoria foi formulada por Hikami[62] e comprovada experimentalmente por vários experimentos em filmes finos de Mg, feitos por Bergmann[63, 64, 65]. A referência [66] traz uma série de resultados experimentais de medidas feitas a partir de filmes finos e de MOSFET's, um transistor de efeito de campo de metal-óxido-semicondutor. A teoria de escala durante muitos anos foi aceita para explicar a propagação de funções de onda em sistemas de duas dimensões. No entanto, muitos trabalhos alguns dentre eles experimentais [20, 67], têm mostrado uma violação dessa teoria, mostrando a existência de estados deslocalizados em determinadas situações.

Neste trabalho, um progresso na linha de análise de escala do modelo de Anderson

bidimensional na presença de correlação de longo alcance na desordem, é reportado. O potencial será gerado de forma a ter uma densidade espectral com decaimento do tipo  $1/k^{\alpha_{2d}}$ . Usando um algoritmo de diagonalização exata, calculamos a função de participação a qual é usualmente tomada para medir a natureza localizada/deslocalizada dos auto-estados de energia. Usando a hipótese de um único parâmetro de escala, usamos a flutuação relativa da função de participação para obter o diagrama de fases e estimar o expoente crítico do comprimento de correlação. Em concordância com o comportamento unidimensional, a largura da fase estendida satura no regime de fortes correlações,  $\alpha_{2d} \rightarrow \infty$ . No entanto, no regime de correlações fracas, os estados próximos do centro da banda permanecem críticos, exibindo uma escala tipo lei de potência. Os valores estimados para o expoente do comprimento de localização mostraram uma dependência com o grau de correlação.

## 3.2 O Modelo

O modelo estudado apresenta desordem correlacionada nas duas direções,  $x$  e  $y$ . A exemplo do caso unidimensional, a desordem é introduzida nas energias dos sítios por meio do traço de um movimento Browniano, numa generalização para o caso bidimensional do problema  $1d$  do capítulo anterior. Nós consideramos um Hamiltoniano do modelo de Anderson  $2d$  numa rede regular  $LxL$ :

$$H = \sum_{i,m} \epsilon_{im} |i, m\rangle \langle i, m| + t \sum_{\langle im, jn \rangle} (|i, m\rangle \langle j, n|). \quad (3.1)$$

No Hamiltoniano acima, o estado  $|i, m\rangle$  é um estado localizado no sítio  $(i, m)$ , na representação de Wannier (*tight binding*). A soma  $\sum_{\langle im, jn \rangle}$ , indica a soma sobre os pares vizinhos. Em nossos cálculos, a amplitude de hopping  $t$ , do segundo termo do Hamiltoniano terá um valor fixo  $t = 1$ . Neste problema cada átomo está localizado em um sítio  $(i, m)$  e, possui apenas um orbital.

Para gerar as correlações de longo alcance na distribuição das energias dos sítios  $\epsilon_{im}$ , utilizamos o método de transformada de Fourier definida por:

$$\epsilon_{i,m} = \sum_{k_i=1}^{L/2} \sum_{k_m=1}^{L/2} \frac{\zeta(\alpha_{2d})}{(k_i^2 + k_m^2)^{\alpha_{2d}/4}} \cos\left(\frac{2\pi i k_i}{L} + \psi_{i,m}\right) \cos\left(\frac{2\pi m k_m}{L} + \phi_{i,m}\right), \quad (3.2)$$

onde  $\psi_{i,m}$  e  $\phi_{i,m}$  são  $L^2/2$  fases aleatórias independentes, distribuídas uniformemente num intervalo de  $[0, 2\pi]$ . A constante  $\varsigma(\alpha_{2d})$  é escolhida de forma que se tenha a variância na energia igual a unidade,  $\Delta\epsilon_{i,m} = 1$  e  $\langle \epsilon_{i,m} \rangle = 0$ . A sequência das energias geradas tem uma densidade espectral que obedece a uma lei de potência bem definida,  $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2d}}$ , e para este caso,  $k = \sqrt{k_i^2 + k_m^2}$ , de forma análoga ao caso unidimensional. Para o caso em duas dimensões, o expoente  $\alpha$  é dado por  $\alpha = 2H + d$ , onde  $H$  é o expoente de Hurst.

Para investigar as propriedades físicas associadas à natureza dos auto-estados de um elétron ( $|\Psi^u\rangle$ ), primeiramente diagonalizamos exatamente o Hamiltoniano da Eq. 3.1 e calculamos a função de participação  $\xi(u)$  definida por [13]:

$$\xi(u) = \frac{\sum_{i,m} |c_{i,m}^{(u)}|^2}{\sum_{i,m} |c_{i,m}^{(u)}|^4}. \quad (3.3)$$

Na equação acima,  $c_{i,m}^{(u)}$  representa as amplitudes dos auto-estados ( $|\Psi^u\rangle$ ) que, na base  $|i, m\rangle$ , terão a forma:  $|\Psi^u\rangle = \sum_{i,m} c_{i,m}^{(u)} |i, m\rangle$ . Como já comentado anteriormente, a função de participação é uma boa estimativa do número de sítios que participam da função de onda. Para estados estendidos  $\xi$  é proporcional ao número de sítios ( $\xi \propto L^2$  para uma rede quadrada). No entanto, funções que apresentam decaimento tipo lei de potência, podem apresentar uma escala anômala na função de participação com  $\xi \propto L^{D_2}$ , com  $D_2 < d$  [43]. Calculamos então a média de  $\xi$  numa pequena janela  $\Delta E$  em torno de  $E$ :

$$\langle \xi(E) \rangle = \left( \sum_{u=E-\Delta E/2}^{u=E+\Delta E/2} \xi(u) \right) / N_E. \quad (3.4)$$

Em geral, usamos  $\Delta E \approx 0.1$  e um grande número de amostras, tal que o número de auto-energias em cada janela ( $N_E$ ) é aproximadamente 20000 para obter uma boa precisão.

A grandeza na qual focamos o interesse no estudo do sistema é a flutuação da participação definida por:

$$\Delta\xi(E) = \sqrt{\langle \xi(E)^2 \rangle - \langle \xi(E) \rangle^2}. \quad (3.5)$$

Nesta equação, o termo  $\langle \xi(E)^2 \rangle$  pode ser calculado de forma similar Eq. 3.4. A

flutuação relativa do número de participação é dada por :

$$\eta(E) = \Delta\xi(E) / \langle \xi(E) \rangle . \quad (3.6)$$

Dentro dos modelos com desordem, foi demonstrado rigorosamente que a função de distribuição da razão de participação é uma grandeza invariante por escala na transição de Anderson[68]. Essa invariância tem sido usada para monitorar o ponto crítico no modelo de hopping aleatórios de longo alcance[69]. Esta invariância deve ser preservada para sistemas gerais que apresentam uma transição localização-deslocalização. Aqui, nós usaremos essa característica para obter o diagrama de fases do modelo de Anderson bidimensional com correlações de longo alcance. Em particular, exploraremos o fato de que a flutuação relativa da função de participação é independente do tamanho da rede no ponto crítico. Somado a isso, nós empregamos uma análise de escala de tamanho finito para estimar o valor do expoente do comprimento de correlação  $\nu$ , o qual dentro da estrutura de hipótese de escala, governa o comportamento de escala do comprimento de escala relevante na vizinhança da mobility edges  $\xi_\infty \propto |E - E_c|^{-\nu}$ .

Uma hipótese de escala de tamanho finito pode ser escrita para a flutuação  $\eta(E)$ , na forma:

$$\eta(E) \propto ((E - E_c)L^{1/\nu}). \quad (3.7)$$

Podemos usar esta hipótese para estimar o valor do expoente  $\nu$  uma vez que, como podemos ver facilmente, a derivada  $\delta = \frac{\partial\eta(E)}{\partial E}$  escala com  $L^{1/\nu}$ .

### 3.3 Resultados

Na Fig. 3.1 nós mostramos gráficos da função de participação para  $\alpha = 2.5$  e  $\alpha = 3.0$ . Nestes gráficos já podemos observar um comportamento não usual do modelo de Anderson. No modelo de Anderson original estas curvas seriam as mesmas independente do tamanho da rede, pois os estados seriam localizados e, permaneceriam localizados para redes de tamanhos diferentes. Mas nesta figura observamos que a medida que o tamanho da rede aumenta o número de sítios que participam da função de onda também aumenta.

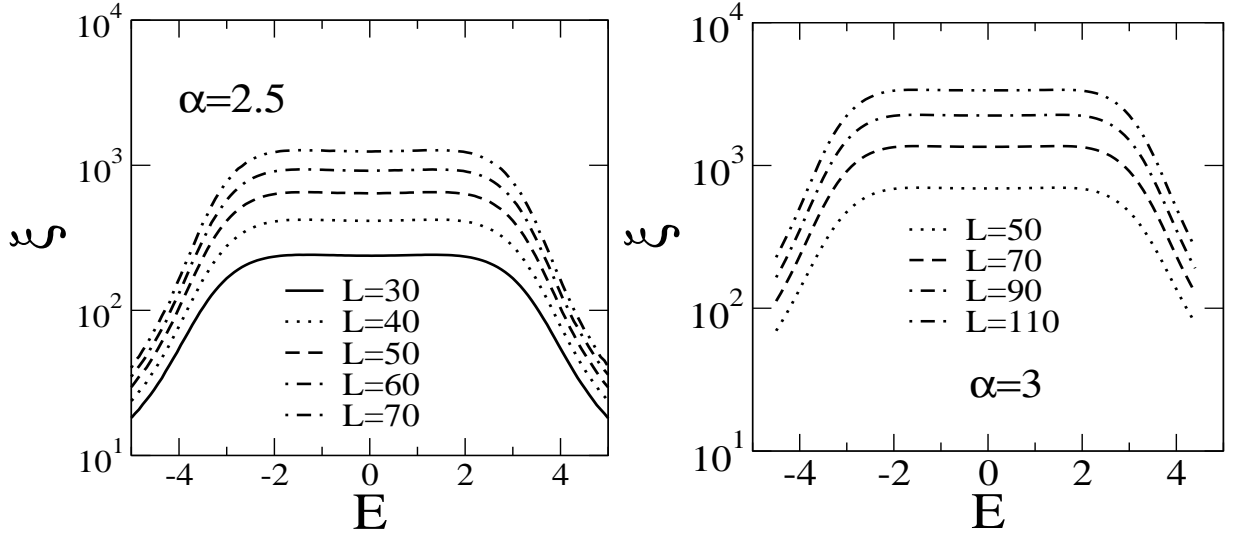


Figura 3.1: Função de participação para  $\alpha = 2.5$  e  $\alpha = 3.0$ . Podemos ver que a participação depende do tamanho da rede, num regime de fortes correlações indicando estados estendidos.

O gráfico da Fig. 3.2 mostra a flutuação relativa da participação  $\eta$  vs a energia  $E$  para  $\alpha_{2D} = 1.5$  com  $L^2 = 30^2, 40^2, 50^2, 60^2$  sítios. Nós observamos um colapso bem definido próximo ao centro da banda. Na parte de baixo e no topo da banda a flutuação aumenta com o tamanho da rede devido a natureza localizada dos auto-estados. O colapso na região de baixas energias está associado com uma escala não linear do número de participação[32]. Isso corresponde a uma região de energia para a qual os auto-estados eletrônicos apresentam um decaimento do tipo lei de potência no modelo de Anderson 2D, mesmo na ausência de correlações na distribuição da desordem[70, 71]. O comportamento da flutuação no centro da banda, é independente do tamanho da rede, o que sugere, um regime crítico.

O gráfico da Fig. 3.3 mostra a flutuação relativa do número de participação  $\eta$  vs a energia  $E$  para  $\alpha_{2D} = 2.5$  com  $L^2 = 30^2, 40^2, 50^2, 60^2, 70^2$ , e  $\alpha_{2D} = 3.0$  com  $L^2 = 50^2, 70^2, 90^2, 110^2$ . Podemos ver neste gráfico um cruzamento bem definido em  $E = E_c$  onde  $E_c$  é o *mobility edge* presente no modelo [32]. Quando temos  $|E| < E_c$  a flutuação relativa diminui com o tamanho do sistema devido a natureza dos estados estendidos. Já para as regiões onde temos  $|E| > E_c$ , a flutuação relativa aumenta com o tamanho da rede, indicando estados localizados. Isto se deve basicamente ao fato de



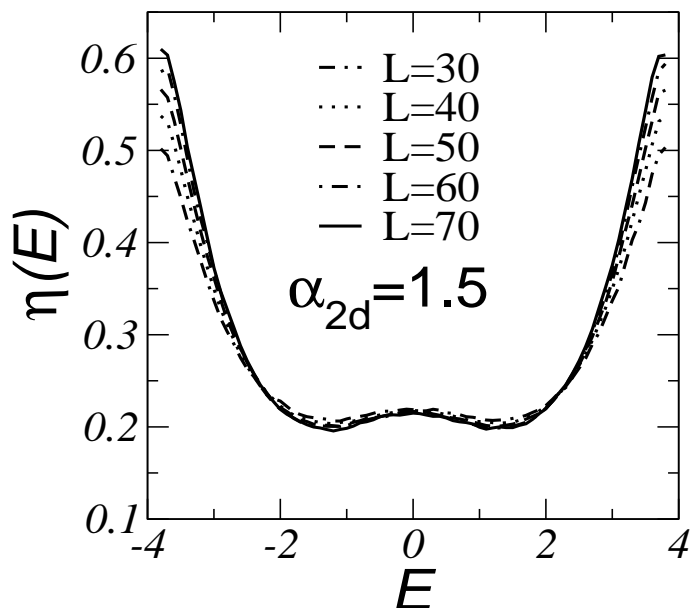


Figura 3.2: Flutuação da participação em função da energia  $E$  para  $\alpha = 1.5$ . Observamos que próximo do centro da banda  $\eta(E)$  é independente do tamanho, indicando um comportamento tipo lei de potência para esta região.

que em regiões de estados localizados a densidade de estados é pequena o que ocasiona uma grande flutuação (desvio da média) da participação, e quanto maior o tamanho do sistema maior será esta flutuação, pois a função de onda permanece localizada, e a média será menos precisa. Em regiões de estados estendidos temos grande densidade de estados, a participação aumenta com o tamanho do sistema e a flutuação para a medida desta participação é menor e diminui a medida que o tamanho do sistema cresce pois aí teremos uma densidade de estados maior e melhores resultados das medidas.

Na Fig. 3.4 mostramos o diagrama de fases do modelo, relacionando as energias críticas com o grau de correlação  $\alpha_{2D}$ . Podemos ver pelo gráfico que no limite de correlações fortes ( $\alpha_{2D} \rightarrow \infty$ ) a largura da banda de estados estendidos satura, ou seja a energia crítica tende a apenas um valor quando o grau de correlação é muito forte. Os estados próximos do centro da banda permanecem críticos, semelhantemente ao comportamento observado na ausência de correlações.

O gráfico da Fig. 3.5 mostra nossa estimativa para o cálculo da derivada  $\delta = \frac{\partial \eta(E)}{\partial E} \propto L^{1/\nu}$ , usando hipótese de escala de tamanho finito com um único comprimento de

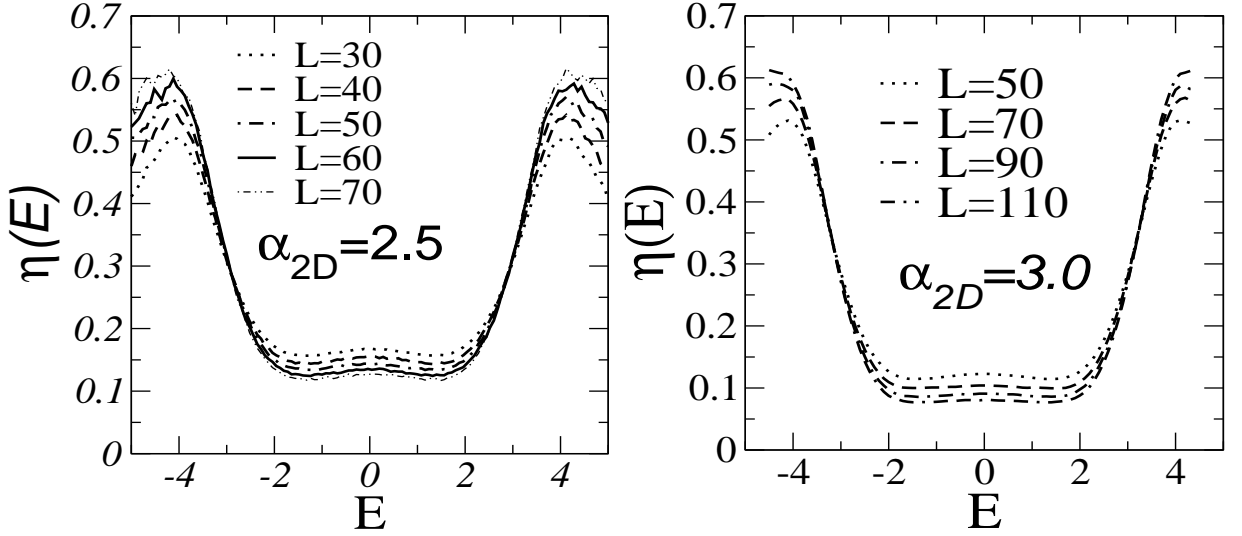


Figura 3.3: Flutuação da participação para  $\alpha = 2.5$  e  $\alpha = 3.0$  para diferentes tamanhos de rede. A invariância de escala sinaliza uma transição entre estados estendidos e localizados.

escala. Nós obtemos o expoente crítico  $\nu = 2.5(5)$  para  $\alpha_{2D} = 2.5$  e  $\nu = 3.20(10)$  para  $\alpha_{2D} = 3.0$ . Para valores maiores de  $\alpha_{2D}$  a estimativa numérica torna-se pouco confiável uma vez que o *mobility edge* se aproxima do extremo da banda, região onde a densidade de estados é pequena, o que empobrece a média estatística e resulta numa barra de erro maior. Usando a estimativa do expoente do comprimento de correlação, nós reportamos os dados da flutuação numa forma universal como mostrado na Fig. 3.6. O ramo superior corresponde a fase de estados localizados, enquanto que o ramo inferior corresponde a fase de estados estendidos de baixa energia. Este gráfico mostra que dados de tamanhos de redes distintos caem na mesma curva, o que reflete a precisão da estimativa do expoente do comprimento de correlação e a ausência de correções de escala significativas.

Nestes trabalho, nós consideramos o modelo de Anderson bidimensional com correlações de longo alcance em ambas as direções  $x$  e  $y$ . Para introduzir correlações de longo alcance neste sistema, aplicamos um método de transformada de Fourier 2D para construir uma sequência de energias *on-site* com densidade espectral  $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2d}}$ . Usando um formalismo de diagonalização exata analisamos a participação e sua flutuação relativa ao longo de uma banda de energia. Para  $\alpha_{2d} > 2$ , nós obtivemos um cruzamento bem definido para a flutuação relativa da participação em  $E = E_c$ , localizando desta forma o *mobility edge* que separa estados estendidos de estados localizados. Para  $|E| < E_c$  a

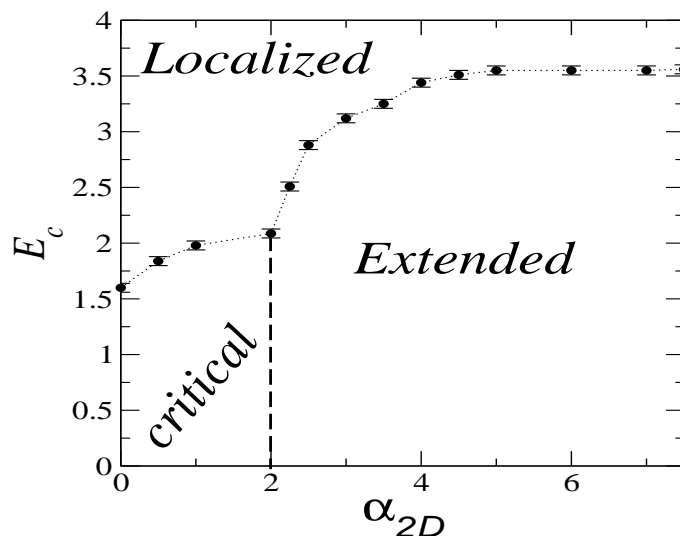


Figura 3.4: Diagrama de fases. A fase de estados estendidos emerge para  $\alpha_{2D} > 2$  e sua largura satura em  $\alpha_{2D} \rightarrow \infty$ . Para  $\alpha_{2D} < 2$  os estados próximos ao centro da banda permanecem críticos.

flutuação relativa diminui quando  $L$  aumenta, o que é uma clara assinatura de estados estendidos. Entretanto para  $|E| > E_c$  a flutuação relativa aumenta com o tamanho do sistema indicando estados localizados. Para  $\alpha_{2d} < 2$  o sistema apresenta uma transição, de estados localizados para estados críticos, já conhecida por ocorrer no modelo de Anderson sem correlações[70, 71].

Encontramos o diagrama de fases completo no plano  $\alpha_{2d} \times E$ . Usando a hipótese de um único parâmetro de escala de tamanho finito, obtivemos um bom colapso de dados de tamanhos diferentes de sistemas perto do ponto crítico. O expoente do comprimento de correlação foi estimado ser  $\nu = 2.50(5)$  para  $\alpha_{2d} = 2.5$  e  $\nu = 3.20(10)$  para  $\alpha_{2d} = 3.0$ , indicando que o expoente do comprimento de correlação não é universal. É importante discutir os resultados a luz do critério estendido de Harris para a possível relevância das correlações de longo alcance em sistemas desordenados, que apresentam transição de fase de segunda ordem[44]. No presente caso, a transição de Kosterlitz-Thouless que ocorre no limite de desordem não correlacionada, é efetivamente descrita como tendo o expoente do comprimento de localização divergente.

O critério estendido de Harris prediz então que correlações de longo alcance mostram-se irrelevantes para o comportamento crítico. Este comportamento é observado para todos

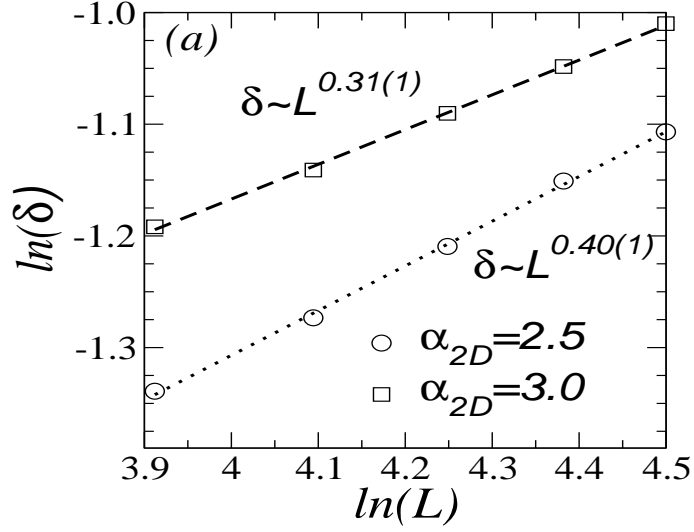


Figura 3.5: A derivada  $\delta = \frac{\partial \eta(E)}{\partial E} \propto L^{1/\nu}$  no *mobility edge*, em função de  $L$  para  $\alpha_{2D} = 2.5$  e  $\alpha_{2D} = 3.0$ . As linhas tracejadas correspondem ao ajuste da lei de potência.

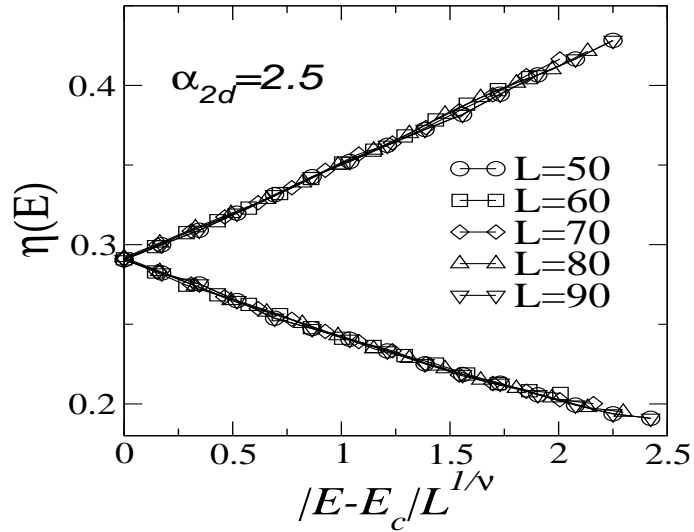


Figura 3.6: Flutuação relativa próxima do ponto crítico em função de  $|E - E_c| L^{1/\nu}$  para  $\alpha_{2D} = 2.5$ .

os valores de  $\alpha_{2d} < 2$ , para os quais a transição de fase permanece do tipo Kosterlitz-Thouless. É interessante observar que esta é uma região de valores de  $\alpha_{2d}$  para os quais o

---

potencial aleatório apresenta incrementos anti-persistentes[14] e inclui todos os potenciais estacionários  $0 < \alpha_{2d} < 1$ [72]. A transição de estados exponencialmente localizados para estados estendidos observado para  $\alpha_{2d} > 2$ , não foi previsto pelo critério de Harris, embora a relevância das correlações de longo alcance na desordem esteja refletida pela não universalidade do expoente do comprimento de localização.

# Capítulo 4

## Conclusões e Perspectivas

Nos anos cinquenta, Anderson havia estabelecido a natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados com um elétron apenas: para fortes graus de desordem os estados eletrônicos eram exponencialmente localizados e, para desordem fraca, os estados eram estendidos. Para um grau de desordem intermediário, o sistema poderia apresentar uma transição metal-isolante com *mobility edges* separando a fase estendida da fase localizada. Desde este período, e durante muitos anos, foi aceito que em sistemas de baixa dimensionalidade todos os estados deveriam ser localizados. No entanto, nos últimos anos muitos trabalhos contendo várias modificações no modelo de Anderson reportaram um comportamento não usual para sistemas de baixa dimensionalidade, ocasionando a violação da teoria de escala. Tal violação já foi inclusive mostrada experimentalmente, o que tem motivado o estudo dessa área.

Neste trabalho estudamos o modelo de Anderson em uma e duas dimensões. Inicialmente estudamos o modelo unidimensional com correlações de longo alcance na distribuição das energias dos sítios. Para introduzir as correlações de longo alcance usamos o traço de um movimento Browniano fracionário de forma a obter uma sequência de densidade espectral  $S(k) \propto 1/k^\alpha$  onde o parâmetro  $\alpha$  controla as correlações. No caso estático unidimensional, utilizando o método de diagonalização exata analisamos o comportamento da participação, onde observamos que em regimes de correlações fracas e  $1 < \alpha < 2$  esta função apresenta um comportamento anômalo numa região de estados localizados. Encontramos que para correlações fracas os estados são localizados e para  $\alpha > 2$  são estendidos, o que viola a teoria de escala. No problema unidimensional no caso dinâmico, resolvemos

a equação de Schrödinger dependente do tempo e analisamos o comportamento da função  $\sigma$  (que mede a evolução temporal da largura do pacote de onda), que apontou um regime de espalhamento balístico para correlações fortes.

No problema bidimensional, introduzimos correlações de longo alcance aplicando um método de transformada de Fourier 2D para construir uma sequência de energias *on-site* com densidade espectral  $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2d}}$ . Usando um formalismo de diagonalização exata, analisamos a participação e sua flutuação relativa ao longo da banda de energia. Por meio da flutuação relativa, encontramos o *mobility edge*. Usando uma análise de escala de tamanho finito, estimamos o valor do expoente do comprimento de localização e encontramos que ele dependia do valor da correlação, não sendo portanto universal. O diagrama de fases completo foi produzido mostrando regiões de estados localizados, críticos e estendidos. Encontramos também que o critério de Harris não pode ser aplicado ao nosso problema porque a transição de estados estendidos para localizados não era prevista por ele, mas as correlações são relevantes para nosso problema.

Como perspectivas para futuros trabalhos, podemos incorporar campos magnéticos no modelo de Anderson e analisar os efeitos deste campo sobre a natureza dos estados eletrônicos do sistema. Além disso podemos investigar efeitos relacionados a campos elétricos dependentes do tempo tais como oscilações de Rabi. Esperamos que o presente trabalho possa estimular futuras investigações nesta importante e ativa área da física da matéria condensada.

# Referências Bibliográficas

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [3] Atualmente, é conhecido que em duas dimensões um acoplamento spin-orbita pode estabilizar uma fase de estados estendidos para desordem fraca: S. Hikami, A.I. Larkin and Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980).
- [4] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Winston, Philadelphia 1976).
- [5] C. Kittel, *Introduction to Solid States Physics* (Wiley, New York 1976)
- [6] G. Burns, *Solid State Physics* (Academic Press, London 1985)
- [7] C. C. Tannoudji, B. Diu F. Laloë , *Quantum Mechanics* vol II (1977)
- [8] Mott N. F. and Twose W D 1961 Adv. Phys. **10** 107
- [9] N. F. Mott, Phil. Mag. **17**, 1259 (1968)
- [10] N. F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor and Francis, London 1974)
- [11] R. Zallen and H. Scher, Phys. Rev B **4**, 4471 (1971)
- [12] F.J. Wegner, Z. Phys. B **36** 209 (1980)
- [13] Kramer B and MacKinnon A 1993 Rep. Prog. Phys.**56** 1469
- [14] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett., **81**, 3735 (1998)



- 
- [15] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42** 673(1979)
- [16] D. J. Thouless, Physics Reports **13**, 93 (1974)
- [17] K. Slevin, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **78**, 4083 1997
- [18] Y. Asada, K. Slevin e Tomi Ohtsuki, Phys. Rev. B **70**, 035115 (2004)
- [19] K. Slevin, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 1999
- [20] Kravchenko, et al., Phys. Rev. B **51**, 7038(1995)
- [21] Lee P A and Ramakrishnan T V 1985 Rev.Mod.Phys. **57** 287(1985)
- [22] G.A. Thomas e M.A. paalanen, *Recent Developments in the Metal Insulator Trandition em Loalization, Interaction, and Transpor Phenomena* Spring Series in Solid-State Sciences editado por B.Kramer, G. Bergmann, e Y.Bruynseraede, **61** p77 (1984)
- [23] S. Waffenschmidt, C. Pfeleiderer, e H.V. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **82** 3005 (1999)
- [24] S. Das Sarma, Song He and X.C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988)
- [25] M. Griniasty and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988)
- [26] J. Bellissard, D. Bessis, and P. Moussa, Phys. Rev. Lett. **49**, 701(1982)
- [27] D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988)
- [28] D.H. Dunlap, H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [29] H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991)
- [30] Veja por exemplo; M. Paczuski, S. Maslov and P. Bak, Phys. Rev. E **53**, 414 (1996) e as referências nele contidas.
- [31] W.S. Liu, T. Chen and S.J. Xiong, J. Phys. Condens. Matter **11**, 6883(1999)
- [32] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, M. Lyra and E.R. Raposo, Europhys. Lett. **66** 585 (2004)

- 
- [33] B. Santos, L.P. Viana, M.L. Lyra, F.A.B.F de Moura, Solid State Communications **138** 585 (2006)
- [34] G. Schubert, A. Weibe, H. Fehske, Physica B **359** 801 (2005)
- [35] P. Bak, C. Tang and K. Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987)
- [36] C.K. Peng et al, Nature (London) **356**, 168 (1992); H.E. Stanley, Fractals **1**, 283 (1993)
- [37] B. B Mandelbrot and J. W. Van Ness SIAM Rev. **10** 422 (1968)
- [38] B. B Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, New York 1983).
- [39] N.P. Greis and H.S. Greenside, Phys. Rev. A **44**, 2324 (1991)
- [40] T. Higuchi, Physica D **31**, 277 (1988)
- [41] C.G. Fox, Pure Appl. Geophys. **131**, 211 (1989)
- [42] *The Science of Fractal Images*, editado por Heinz-Otto Peitgen e Dietmar Saupe (Springer-Verlag, New York 1988)
- [43] T. Kawarabayashi and T. Ohtsuki, Phys. Rev. B **51**, 10897 (1995)
- [44] A. Weinrib and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **27**, 413 (1983)
- [45] B. Huckestein, Rev. Mod. Phys. **67** 357 (1995)
- [46] F. Domínguez-Adame, E. Maciá, and A. Sánchez, Phys. Rev. B **48**, 6054 (1993); *ibid.* **49**, 147 (1994); A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, J. Phys A: Math. Gen. **27**, 3725 (1994); F. Domínguez-Adame, E. Diez, and A. Sánchez, Phys. Rev. B **51**, 8115 (1995)
- [47] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Physica A, **4**, 466 (1999)
- [48] F. A. B. F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **66**, 014418 (2002)
- [49] F. A. B. F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **68**, 012202 (2003)

- 
- [50] F.D. Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F de Moura e M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **91** 197402(2003)
- [51] A.D. Mirlin, Y.V. Fyodorov, F.-M. Dittes, J. Quezada and T.H. Seligman, Phys. Rev. E **54**, 3221 (1996)
- [52] J.C. Cressoni and M.L. Lyra, Physica A **256**, 18 (1998)
- [53] A. Rodríguez, V.A. Malyshev, G. Sierra, M.A. Martín-Delgado, J. Rodríguez-Laguna, and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. Lett. **90**, 027404 (2003)
- [54] F.A.B.F. de Moura, A.V. Malyshev, M.L. Lyra, V.A. Malyshev and F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B **71**, 174203 (2005).
- [55] V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G .B. Parravicini, and F. Domínguez-Adame, Physica E **7**, 823 (2000).
- [56] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, and S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 41102 (2001).
- [57] F.M. Izrailev and A.A. Krokhin, Phys. Rev. Lett., **82**, 4062 (1999)
- [58] H. Shima, T. Nomura, T. Nakayama, Phys. Rev. B **70** (2004) 075116.
- [59] M. L. Ndawana, R. A. Romer and M. Schreiber, Europhys. Lett. **68**, 678 (2004)
- [60] Wen-Sheng Liu, S. Y. Liu and X. L. Lei, Eur. Phys. J. B **33**, 293 (2003)
- [61] D. Taras-Semchuk e K.B. Efetov, Phys. Rev. B, **64** 115301 (2001)
- [62] S.Hikami Prog. Theor. Phys. **64** 1466 (1980)
- [63] G. Bergmann Phys. Rev. Lett. **48** 1046 (1982)
- [64] G. Bergmann Phys. Rev. Lett. **49** 162 (1982)
- [65] G. Bergmann Phys. Rep. **107** 1 (1984)
- [66] E. Abrahams, S.V. Kravchenko e M. P. Sarachik, Reviews of Mod. Phys., **73** 251 2001
- [67] Kravchenko, et al., Phys. Rev. B **50**, 8039(1994)

- 
- [68] F. Evers and A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **84**, 3690 (2000); Phys. Rev. B **62**, 7920 (2000)
- [69] A. V. Malyshev, V. A. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **70**, 172202 (2004).
- [70] J. L. Pichard and G. Sarma, J. Phys. C: Solid State Phys. **14**, L127 (1981)
- [71] I. M. Suslov, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **128**, 768 (2005) [Sov. Phys. JETP **101**, 661 (2005)].
- [72] H. Yamada, Phys. Rev. B **69**, 014205 (2004).
- .