

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Dissertação de Mestrado

**Estados Ressonantes e superdifusão
do pacote de onda em cadeias
correlacionadas com desordem
diluída**

Filipe Ferreira Santos Leão

Maceió

2011

Filipe Ferreira Santos Leão

Estados Ressonantes e superdifusão
do pacote de onda em cadeias
correlacionadas com desordem
diluída

Dissertação apresentada ao Instituto de
Física da Universidade Federal de Alagoas,
como parte dos créditos para a obtenção do
título de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Marcelo Leite Lyra

Maceió

2011

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto

L437e Leão, Filipe Ferreira Santos Leão.
Estados ressonantes e superdifusão do pacote de onda em cadeias correlacionadas com desordem diluída / Filipe Ferreira Santos Leão. – 2011.
61 f., graf.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.
Dissertação (mestrado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2011.

Bibliografia: f. 57-61.

1. Ácido desoxirribonucléico - Transporte eletrônico. 2. Desordem diluída.
3. Desordem correlacionada. 4. Localização de Anderson. I. Título.

CDU: 538.935



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
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

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

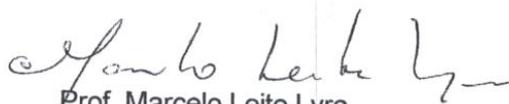
**“Estados Ressonantes e superdifusão em cadeias
correlacionadas com desordem diluída”**

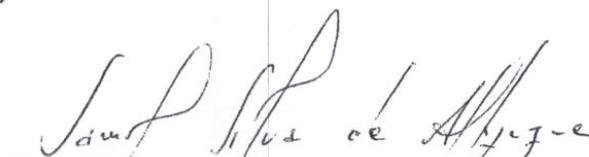
por

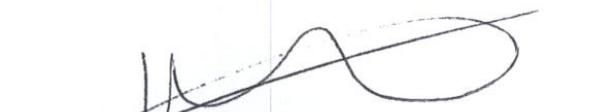
Filipe Ferreira Santos Leão

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Samuel Silva de Albuquerque, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas/Pólo Arapiraca e Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 26 de fevereiro de 2011


Prof. Marcelo Leite Lyra


Prof. Samuel Silva de Albuquerque


Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família pelo esforço que sempre dedicaram à minha criação e em particular a atenção e importância que deram à minha educação.

Aos meus colegas, pela união demonstrada nos momentos de dificuldade e pela descontração nas horas vagas.

Ao prof. Marcelo Lyra, pela orientação e paciência, e aos demais professores do Instituto de Física da UFAL.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Física da Matéria Condensada, ao Grupo de Física Teórica e Computacional e ao Instituto de Física da UFAL, bem como o apoio financeiro da CAPES.

RESUMO

Nesta dissertação de mestrado analisaremos um modelo de Hamiltoniano *tight-binding* para um sistema de dupla cadeia com desordem correlacionada e diluída. A introdução das correlações inter-cadeias é feita através da imposição $\epsilon_{i,s} = -\epsilon_{i,-s}$, onde $s = \pm 1$ é o índice que indica à qual das duas cadeias da escada estamos nos referindo. A seguir consideraremos cada cadeia da escada como composta de duas sub-cadeias interpenetrantes, uma ordenada e outra aleatória. Demonstraremos que a presença de uma distribuição aleatória em uma das cadeias interpenetrantes induz uma localização de Anderson, exceto em um par simétrico específico de autoestados de energia. Adicionalmente, integrando a equação de Schrödinger dependente do tempo, nós seguimos a evolução temporal de um pacote de onda de um elétron inicialmente localizado. Nós mostramos que os estados ressonantes delocalizados são responsáveis por um alargamento superdifusivo da dispersão do pacote de onda, enquanto a função participação permanece finita. Uma análise de escala da distribuição do pacote de onda mostra que ela obedece a uma forma de escala universal com o desenvolvimento de caudas do tipo lei de potência e um cutoff que evolui superdifusivamente. Nós obtemos três expoentes que caracterizam esta dinâmica superdifusiva e mostramos que eles satisfazem uma relação de escala simples.

Palavras-chave: transporte eletrônico no DNA, desordem diluída, desordem correlacionada.

Abstract

In this work, we study a tight-binding Hamiltonian model system of a binary correlated ladder with diluted disorder. We introduce intra-chain correlations between the on-site potentials by imposing that $\epsilon_{i,s} = -\epsilon_{i,-s}$ where $s = \pm 1$ indexes the two ladder chains. Further we consider each ladder chain as composed of inter-penetrating ordered and random sub-chains. We show that the presence of a random on-site distribution in one of the inter-penetrating chains leads to Anderson localization except at a specific symmetric pair of energy eigenmodes. Further, by integrating the time-dependent Schroedinger equation, we follow the time-evolution of an initially localized one-electron wave-packet. We report that the remaining delocalized resonant modes are responsible for a super-diffusive spread of the wave packet dispersion while the wave packet participation function remains finite. A scaling analysis of the wave packet distribution shows that it obeys a universal scaling form with the development of a power-law tail followed by a super-diffusively evolving cutoff. We obtain three exponents characterizing this super-diffusive dynamics and show that they satisfy a simple scaling relation.

Keywords: Eletronic Transport in DNA, diluted disorder, correlated disorder, Anderson localization.

Sumário

1	INTRODUÇÃO - TRANSPORTE ELETRÔNICO	8
1.1	Introdução	8
1.2	O Modelo de Drude	10
1.3	Teoria de Sommerfeld para os Metais	11
1.3.1	Propriedades do Estado Fundamental de um Gás de Elétrons	12
1.4	O Problema da Capacidade Térmica do Gás de Elétrons	17
1.5	O Modelo de Bloch	18
1.6	A Aproximação <i>Tight-binding</i>	19
1.7	O Modelo de Anderson	22
1.8	A teoria de escala e a transição de Anderson	25
1.9	Correlações no modelo de Anderson	30
2	TRANSPORTE ELETRÔNICO NO DNA	35
2.1	Introdução	35
2.2	A Molécula de DNA	37
2.3	Transporte Eletrônico no DNA	39
2.4	O Papel das Correlações e Acoplamento entre Cadeias	39
2.5	Efeito da Desordem Diluída	40
3	CADEIAS COM DESORDEM CORRELACIONADA E DILUÍDA	43
3.1	Introdução	43
3.2	Modelo e Formalismo	44

SUMÁRIO	7
3.3 Resultados	48
4 CONCLUSÃO	55
REFERÊNCIAS	57

1

INTRODUÇÃO - TRANSPORTE ELETRÔNICO

1.1 Introdução

Os primeiros estudos sobre as propriedades eletrônicas dos sólidos os modelavam como estruturas periódicas perfeitas. Porém, é sabido que qualquer sólido real, seja ele encontrado na natureza ou produzido em laboratório, não possui uma simetria translacional completa. Os sólidos possuem desordem em suas estruturas, que podem ser ocasionadas por impurezas, distorções na rede ou vibrações da estrutura cristalina ($T \neq 0$). A desordem desempenha um papel crucial nas propriedades eletrônicas dos sólidos. Um bom exemplo é que no modelo de Bloch, que considera cristais perfeitos, não há resistência elétrica.

P. W. Anderson, em 1958, foi o primeiro a propor um modelo para os sólidos onde se incluía desordem [1]. Neste trabalho, foi mostrado que para um valor de desordem maior que certo valor crítico W_c a função de onda eletrônica fica restrita a uma região finita do espaço e não há transporte. No entanto, se a largura da desordem for menor W_c , o sistema apresenta estados estendidos em uma faixa de energias em torno do centro da banda. Estes estados estendidos separam duas faixas de energias com estados localizados

nas proximidades dos extremos da banda. Quando a energia de Fermi ϵ_F estiver em uma faixa de energias onde os estados são estendidos, tem-se uma fase metálica, caso contrário o sistema é isolante. Evidencia-se assim a possível ocorrência de uma transição metal-isolante induzida por desordem, denominada transição de Anderson.

A hipótese de um único parâmetro de escala proposta por Abrahams e colaboradores [2], prevê que não deve haver uma transição de Anderson para sistemas com dimensão $d \leq 2$. Contudo, modelos recentes que incluem no sistema desordem correlacionada, acoplamentos de longo-alcance, ou a presença de um campo magnético externo, têm mostrado a existência de transições de Anderson para sistemas de baixa dimensionalidade.

Recentemente, tem havido um grande interesse no estudo das propriedades eletrônicas de sistemas compostos por cadeias acopladas devido a sua estrutura ser semelhante a segmentos da molécula do DNA. A presença de correlações entre as cadeias relacionadas ao emparelhamento entre as bases nucleotídias, bem como a existência de correlações ao longo de cada cadeia afeta a natureza dos estados eletrônicos. Nessa dissertação, nós iremos estudar um modelo de cadeias acopladas no qual nós incluiremos características da molécula do DNA, em particular o emparelhamento entre bases. Adicionalmente, nós iremos considerar a presença de desordem em uma sub-rede do sistema. Estaremos interessados em investigar os efeitos causados pela diluição da desordem na dinâmica do pacote de onda de um elétron. Modelos com desordem diluída podem suportar estados ressonantes estendidos. Nosso objetivo é investigar como a presença destes estados ressonantes pode influenciar a evolução temporal de pacotes de onda inicialmente localizados.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. No restante deste capítulo, nós iremos fazer uma breve revisão sobre os principais aspectos relacionados ao transporte eletrônico em sistemas desordenados. No capítulo 2, nós discutiremos algumas propriedades da molécula do DNA e revisaremos alguns trabalhos recentemente publicados que abordam a questão do transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade com características extraídas da molécula do DNA. No capítulo 3 nós apresentaremos o modelo estudado nessa dissertação e analisaremos a natureza dos estados eletrônicos e a dinâmica

do pacote de onda. Por fim, nós apresentamos nossas conclusões no capítulo 4.

1.2 O Modelo de Drude

Metais são excelentes condutores de calor e eletricidade, são dúcteis e maleáveis e apresentam brilho em suas superfícies recém-expostas. Tentar explicar estas características foi o ímpeto inicial da moderna teoria dos sólidos. Um século de pesquisas se acumulou na tentativa de explicar o estado metálico, e apesar de muito progresso, os modelos mais antigos, com suas terríveis falhas em alguns aspectos, ainda são úteis hoje como uma forma prática de estimar propriedades que requerem uma considerável análise para resultados mais precisos.

Apenas três anos após a descoberta do elétron por J. J. Thomson, P. Drude construiu seu modelo para a condução elétrica e térmica dos metais, usando o sucesso alcançado pela teoria cinética dos gases e expandindo estes resultados para um metal, considerado como um gás de elétrons. No entanto, existe uma diferença fundamental entre os gases e os metais: enquanto nos gases mais simples existe apenas um tipo de partícula, nos metais existem pelo menos duas, já que os elétrons têm carga negativa e os metais são eletricamente neutros. Para contornar este problema, Drude assumiu que a carga positiva compensadora estaria em partículas muito mais pesadas e imóveis (caroços).

Assim como na teoria cinética, no modelo de Drude as colisões são eventos instantâneos que alteram a velocidade do elétron abruptamente. Estas colisões são atribuídas ao espalhamento dos elétrons pelos caroços impenetráveis, em vez de colisões elétron-elétron, o análogo do mecanismo presente num gás ordinário. No ínterim entre as colisões não há qualquer tipo de interação. A aproximação que desconsidera a interação entre os elétrons é chamada de aproximação do elétron independente, enquanto a que despreza as interações elétron-íon, são chamadas de aproximação do elétron livre. Um dos méritos da teoria de Drude foi a explicação para a lei de Ohm e uma estimativa para a resistência elétrica.

O resultado mais importante da teoria de Drude foi sua explicação para a lei empírica de Wiedemann e Franz para a condução térmica dos metais. Esta lei afirma que a

razão, κ/σ , entre as condutividades térmica e elétrica é diretamente proporcional à temperatura, com uma constante de proporcionalidade aproximadamente igual para todos os metais.

A maior dificuldade enfrentada pelo modelo de Drude foi em relação a capacidade térmica dos elétrons de condução. A distribuição clássica de Maxwell-Boltzmann prevê que a capacidade térmica de uma partícula livre deve ser $\frac{3}{2}k_B$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Num metal com N átomos, cada um cedendo um elétron de valência para o gás eletrônico, a contribuição eletrônica para a capacidade térmica dever ser $\frac{3}{2}Nk_B$, da mesma forma que para os átomos de um gás monoatômico. No entanto, os dados experimentais mostram uma contribuição eletrônica à temperatura ambiente usualmente menor que um 1% deste valor. Este problema só foi resolvido com o advento da mecânica quântica e sua aplicação no estudo dos metais através do modelo de Sommerfeld.

1.3 Teoria de Sommerfeld para os Metais

Drude assumiu que a distribuição de velocidades dos elétrons, da mesma forma que um gás clássico ideal de densidade n , era dada no equilíbrio a uma temperatura T pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. Para esta distribuição, o número de elétrons por unidade de volume com velocidade entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ é dado por $f_{MB}(\mathbf{v})d^3\mathbf{v}$, onde

$$f_{MB}(\mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \quad (1.1)$$

e n é o número de elétrons por unidade de volume, k_B é a constante de Boltzmann e m é a massa do elétron.

A teoria estava de acordo com a lei empírica de Wiedemann Frantz, que mostrava que a razão entre a condutividade térmica e a condutividade elétrica dos metais é linear com a temperatura, mas previa uma contribuição para o calor específico de um metal de $\frac{3}{2}k_B$ por elétron que não foi observada. O mistério foi resolvido cerca de 25 anos depois com o advento da mecânica quântica e a descoberta de que elétrons seguem o princípio da

exclusão de Pauli, o que requer a substituição da distribuição de Maxwell-Boltzmann pela distribuição de Fermi-Dirac, dada por

$$f_{FD}(\mathbf{v}) = \frac{(m/\hbar)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{1}{2}mv^2 - k_B T_0\right)/k_B T\right] + 1} \quad (1.2)$$

Aqui T_0 é uma temperatura determinada pela condição de normalização

$$n = \int d^3\mathbf{v} f(\mathbf{v}) \quad (1.3)$$

e é tipicamente da ordem de $10^4 K$ [6].

O modelo de Sommerfeld é basicamente o modelo de Drude com a única modificação da distribuição das velocidades dos elétrons ser dada pela distribuição de Fermi-Dirac em vez da distribuição de Maxwell-Boltzmann, já que elétrons são férmions e, portanto, estão sujeitos ao princípio da exclusão de Pauli. Essa única alteração foi suficiente para resolver as anomalias térmicas do modelo de Drude.

1.3.1 Propriedades do Estado Fundamental de um Gás de Elétrons

Nesta seção analisaremos as propriedades do estado fundamental de N elétrons confinados num volume V . Como neste trabalho estamos assumindo a aproximação do elétron independente, os elétrons não interagem entre si e podemos achar o estado fundamental simplesmente calculando os níveis de energia de um único elétron no volume V , e então preencher estes níveis de uma maneira consistente com o princípio da exclusão de Pauli, que permite que cada nível seja ocupado por apenas um elétron. Um elétron é descrito pela sua função de onda $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e pela especificação de seu spin. Para elétrons livres, o termo potencial da equação de Schrödinger é nulo, e ficamos com:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

Representaremos o confinamento dos elétrons no volume V através de condições de contorno na Eq. (1.4). A escolha das condições de contorno pode ser feita com bastante

liberdade, pois as propriedades do *bulk* metálico praticamente não são afetadas por essa escolha, e não estamos interessados em efeitos de superfície. Assim sendo, escolheremos a forma do metal que mais se adequa às nossas necessidades matemáticas. A escolha canônica é o cubo de lado $L = V^{\frac{1}{3}}$. Tomando condições periódicas de contorno, temos:

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z+L) &= \psi(x,y,z) \\ \psi(x,y+L,z) &= \psi(x,y,z) \\ \psi(x,y,z+L) &= \psi(x,y,z)\end{aligned}\tag{1.5}$$

As soluções da equação de Schrödinger para a partícula livre (1.4), sujeita às condições de contorno (1.6), são funções de onda da forma de ondas planas

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),\tag{1.6}$$

desde que os componentes do vetor de onda \mathbf{k} satisfaçam

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}.\tag{1.7}$$

Escolhemos a condição de normalização de forma que a probabilidade de encontrar o elétron em algum lugar no volume V seja unitária:

$$\int d\mathbf{r} |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = 1\tag{1.8}$$

Os componentes de \mathbf{k} são os números quânticos do problema, juntamente com o número quântico de spin. Substituindo nossa solução na equação de Schrödinger, obtemos a energia ϵ_k do orbital com vetor de onda \mathbf{k} :

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2).\tag{1.9}$$

Para ver a significância do vetor \mathbf{k} , perceba que a onda plana $\psi_{\mathbf{k}}$ é uma autofunção

do momento linear com autovalor $\hbar\mathbf{k}$:

$$\mathbf{p}\psi_{\mathbf{k}}(r) = -i\hbar\nabla\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.10)$$

Como uma partícula no autoestado de um operador tem um valor definido do observável correspondente dado pelo autovalor, um elétron no estado $\psi_{\mathbf{k}}$ tem um momento definido proporcional a \mathbf{k} :

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (1.11)$$

e a velocidade é dada por $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m$. Agora podemos justificar o fato de \mathbf{k} ser chamado de vetor de onda: a onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ é constante em qualquer plano perpendicular a \mathbf{k} (já que estes planos são definidos por $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = \text{constante}$) e é periódica ao longo de linhas paralelas a \mathbf{k} , com comprimento de onda λ , conhecido como comprimento de onda de de Broglie.

Devido à hipótese de elétrons não interagentes, podemos construir o estado fundamental de N elétrons colocando elétrons nos níveis permitidos de um elétron. O princípio da exclusão de Pauli desempenha um papel central nesta construção: só podemos colocar um elétron em cada nível. Cada nível é especificado pelo vetor de onda \mathbf{k} e a projeção do spin do elétron ao longo de um eixo arbitrário, que pode assumir apenas dois valores: $\hbar/2$ ou $-\hbar/2$. Portanto, para cada vetor de onda \mathbf{k} temos associados dois níveis eletrônicos, um para cada direção de spin.

Começamos por colocar dois elétrons com vetor de onda $\mathbf{k}=0$, que têm a menor energia possível para um elétron $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$. Continuamos a adicionar elétrons, preenchendo os níveis de menor energia que ainda não estão ocupados. Como a energia de um elétron é proporcional ao quadrado de seu vetor de onda (Eq. 1.9), quando a quantidade N de elétrons é um número muito grande, a região ocupada se aproxima de uma esfera no espaço \mathbf{k} . Se a região não fosse esférica, isto significaria que poderíamos construir um estado de menor energia movendo elétrons com vetor de onda mais distantes de $\mathbf{k} = 0$ para níveis desocupados com vetores de onda mais próximos da origem e não estaríamos no estado

fundamental. O raio da esfera construída para o estado fundamental, é chamado de raio de Fermi (k_F) e seu volume é $4\pi k_F^3/3$. A energia na superfície desta esfera é chamada de energia de Fermi:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2. \quad (1.12)$$

As equações (1.7) nos mostram que há um vetor de onda permitido por $(2\pi/L)^3$ unidades de volume do espaço \mathbf{k} . Logo, o número total de orbitais ocupados no estado fundamental é dado por:

$$2 \cdot \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N, \quad (1.13)$$

onde o fator 2 vem da degenerescência de spin. De (1.13), temos:

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}, \quad (1.14)$$

que depende apenas da concentração de partículas.

Usando (1.12) e (1.14),

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}. \quad (1.15)$$

Esta equação relaciona a energia de Fermi com a concentração eletrônica N/V .

Agora encontraremos uma expressão para o número de orbitais por unidade de energia, $D(\epsilon)$, chamada densidade de estados. Usando (1.12) para encontrar o número total de orbitais com energia menor ou igual a ϵ :

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad (1.16)$$

de forma que a densidade de estados (Fig. (1.1)) é dada por

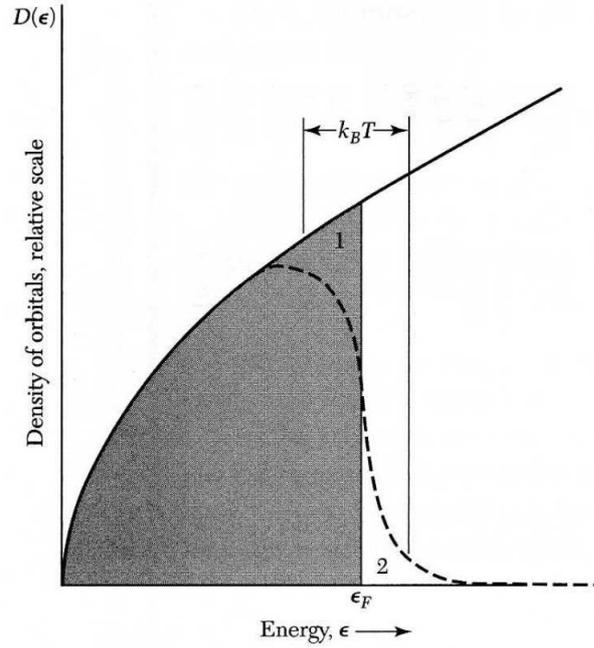


Figura 1.1: Densidade de estados de uma partícula como função da energia, para um gás de elétrons livres em três dimensões. A curva tracejada representa a densidade $f(\epsilon, T)D(\epsilon)$ de orbitais ocupados em uma temperatura finita, mas tal que $k_B T$ é pequeno em comparação com ϵ_F . A área sombreada representa os orbitais ocupados no zero absoluto. A energia média aumenta quando a temperatura aumenta de 0 a T , pois os elétrons são excitados da região 1 para a região 2.

$$D(\epsilon) \equiv \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \epsilon^{1/2}. \quad (1.17)$$

Este resultado pode ser expresso numa forma mais simples se compararmos (1.16) com (1.17) para obter em ϵ

$$D(\epsilon) \equiv \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{3N}{2\epsilon}. \quad (1.18)$$

A menos de um fator da ordem da unidade, o número de orbitais por unidade de energia calculado na energia de Fermi é o número total de elétrons dividido pela energia de Fermi, como é de se esperar.

1.4 O Problema da Capacidade Térmica do Gás de Elétrons

O maior problema que afligia os físicos no começo do desenvolvimento da teoria dos elétrons nos metais era o problema da capacidade térmica dos elétrons de condução. A mecânica estatística clássica prevê uma capacidade térmica de $\frac{3}{2}k_B$ por partícula livre, onde k_B é a constante de Boltzmann. Se N átomos doam um elétron de valência cada para o gás de elétrons, e os elétrons são livres para se mover, então a contribuição para a capacidade térmica deveria ser de $\frac{3}{2}Nk_B$, da mesma forma que para os átomos de um gás monoatômico. Entretanto, a contribuição eletrônica à temperatura ambiente é normalmente menos de 1% deste valor.

Tinha-se um aparente paradoxo: como os elétrons podem participar da condução elétrica como entidades móveis e ao mesmo tempo não contribuírem significativamente para a capacidade térmica? A resposta viria com o surgimento da teoria quântica, especificamente, com a descoberta do princípio da exclusão de Pauli e a distribuição de Fermi-Dirac.

A solução para o mistério é que quando aquecemos uma amostra a partir do zero absoluto, nem todo elétron ganha uma energia da ordem de $k_B T$ como é esperado classicamente, apenas os elétrons em orbitais dentro de um intervalo $k_B T$ da energia de Fermi são termicamente excitados, porque somente estes podem pular para orbitais desocupados.

O valor obtido para a capacidade térmica eletrônica segundo a teoria de Sommerfeld é

$$C_{el} = \frac{1}{2}\pi^2 N k_B^2 T / \epsilon_F. \quad (1.19)$$

Este valor para a capacidade térmica eletrônica difere do valor clássico por um fator $\pi^2 k_B T / 3\epsilon_F$ e depende linearmente da temperatura, enquanto a capacidade térmica iônica depende do cubo da temperatura. Esta previsão provê um meio de testarmos a teoria do gás eletrônico, se tivermos certeza de que outros graus de liberdade que não o eletrônico não farão contribuições da mesma grandeza ou até mesmo maiores para a capacidade térmica.

À altas temperaturas, a contribuição iônica domina completamente a capacidade térmica, devido a sua dependência com o cubo da temperatura. Mas esta mesma dependência faz com que à baixas temperaturas sua contribuição decaia com o cubo da temperatura, enquanto a contribuição eletrônica decai apenas linearmente, permitindo que sejam feitos experimentos para estimar esta contribuição.

1.5 O Modelo de Bloch

O modelo de Bloch considera um cristal perfeito, ou seja, nos quais os íons formam um arranjo regular periódico. Os elétrons estão submetidos a um potencial com a periodicidade da rede de Bravais subjacente, isto é, um potencial $U(\mathbf{r})$ que satisfaz a condição $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$, para todos os vetores \mathbf{R} da rede.

O problema de elétrons em um sólido é, em princípio, um problema de muitos elétrons. O Hamiltoniano do sólido contém não apenas os termos que descrevem as interações entre os elétrons e os núcleos, como também potenciais descrevendo as interações tipo elétron-elétron. Na aproximação do elétron independente estas interações são representadas por um potencial efetivo de um elétron $U(\mathbf{r})$. Mais ainda, as propriedades de transporte eletrônico em sistemas periódicos estão intimamente relacionadas à natureza dos estados eletrônicos. Somos levados, portanto, a considerar as propriedades dos estados de um único elétron sujeito a um potencial periódico.

Analizamos, portanto, a equação de Schrödinger, que rege o comportamento de um elétron,

$$H\psi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi = \epsilon\psi. \quad (1.20)$$

O exemplo mais simples de potencial periódico é o caso de elétrons livres, em que temos o potencial identicamente nulo.

Elétrons que obedecem a equação de Schrödinger com potencial periódico são chamados de elétrons de Bloch e seus estados estacionários têm uma propriedade bas-

tante interessante em virtude da periodicidade do potencial. O teorema de Bloch afirma que os estados estacionários são da forma de uma onda plana vezes uma função com a periodicidade da rede.

$$\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

onde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. As funções $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são chamadas de funções de Bloch. O índice n aparece porque para cada vetor de onda \mathbf{k} , a equação de Schrödinger admite várias soluções. Este índice é conhecido como índice de banda. Cada índice de banda n corresponde a um nível eletrônico $E_n(k)$ chamado de banda de energia.

Uma forma equivalente do teorema de Bloch é que os autoestados do Hamiltoniano, H , estão associados a um vetor de onda \mathbf{k} tal que para cada ψ

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}). \quad (1.22)$$

O teorema de Bloch introduz um vetor de onda \mathbf{k} , que exerce um papel no problema de potencial periódico semelhante aquele exercido pelo vetor de onda do elétron livre. Devemos salientar, entretanto, uma importante diferença: enquanto o vetor de onda do elétron livre é \mathbf{p}/\hbar , onde \mathbf{p} é o vetor de onda do elétron, no caso de elétrons de Bloch \mathbf{k} não é proporcional ao momento eletrônico. Isto ocorre porque o Hamiltoniano não tem invariância translacional completa na presença de um potencial que não é constante, seus autoestados não são, portanto, autoestados simultâneos do operador momento.

O vetor de onda dos elétrons de Bloch é um número quântico que reflete a simetria de um potencial periódico, da mesma forma que o momento \mathbf{p} reflete a simetria translacional completa do espaço livre.

1.6 A Aproximação *Tight-binding*

Até o momento vimos modelos de cálculos dos níveis eletrônicos num metal através do modelo do gás de elétrons, apenas fracamente perturbados por um potencial periódico

dos íons. Porém, existe uma abordagem diametralmente oposta a esta: considerar um sólido (metal ou isolante) como uma coleção de átomos neutros fracamente interagentes. Os elétrons estariam então localizados em níveis atômicos nos sítios da rede, em vez de espalhados por toda a rede como no caso do gás de elétrons e suas funções de onda em nada lembrariam as ondas planas dos elétrons livres. Esta aproximação é válida para o caso em que a constante de rede é grande em relação ao alcance da função de onda.

A aproximação *tight-binding* lida com o caso em que a superposição dos orbitais atômicos é suficiente para requerer correções à visão de átomos isolados, mas não grande o suficiente para deixar a descrição atômica irrelevante. Esta aproximação é bastante útil na descrição das bandas de energia que surgem de orbitais d parcialmente preenchidos dos átomos de metais de transição e na descrição da estrutura eletrônica de materiais isolantes.

À parte de sua utilidade prática, a aproximação *tight-binding* nos fornece um meio instrutivo de ver funções de Bloch complementares àquelas da visão de elétrons quase livres, permitindo uma unificação entre dois modelos aparentemente contraditórios: o modelo de níveis atômicos localizados de um lado e o modelo de elétrons livres do outro.

Para desenvolvermos a aproximação *tight-binding*, assumiremos que nas vizinhanças de cada ponto da rede, o Hamiltoniano do cristal como um todo, H , pode ser aproximado pelo Hamiltoniano, H_{at} , de um único átomo localizado no ponto da rede em questão. Outra hipótese necessária é que os estados ligados do Hamiltoniano atômico sejam localizados, i.e., se φ_n é um estado ligado de H_{at} para um átomo na origem, ($H_{at}\varphi_n = E_n\varphi_n$), então $\varphi_n(\mathbf{r})$ deve ser pequena quando a distância r ultrapassa a ordem da distância da constante da rede.

No caso extremo em que o Hamiltoniano do cristal começa a diferir de H_{at} , as funções de onda $\varphi_n(\mathbf{r})$ ainda são excelentes aproximações para os autoestados do Hamiltoniano do cristal, com autovalores E_n . As funções $\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ também serão excelentes aproximações, para todos os \mathbf{R} da rede de Bravais, já que H tem a periodicidade da rede.

Para o cálculo das correções deste caso extremo, escrevemos o Hamiltoniano do cristal, H , como o Hamiltoniano atômico com a adição de uma perturbação:

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}), \quad (1.23)$$

onde $\Delta U(\mathbf{r})$ contém todas as correções no potencial atômico necessárias para produzir o potencial periódico completo do cristal.

Uma solução $\psi(\mathbf{r})$ para a equação de Schrödinger independente do tempo de um elétron é então aproximada por uma combinação linear dos orbitais atômicos, $\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n, \mathbf{R}} b_n(\mathbf{R}) \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (1.24)$$

Assumiremos que a base primitiva tem apenas um átomo. A simetria translacional do cristal implica que uma translação na função de onda pode mudar apenas a sua fase (teorema de Bloch):

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}). \quad (1.25)$$

Escolhendo $b_n(\mathbf{R}) = N^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$ a função de onda fica:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n, \mathbf{R}} N^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (1.26)$$

e a condição (1.25) será satisfeita:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= N^{-1/2} \sum_{n, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}'} \varphi_n(\mathbf{r} + \mathbf{R} - \mathbf{R}') \\ &= N^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \left[\sum_{n, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})} \varphi_n(\mathbf{r} - (\mathbf{R}' - \mathbf{R})) \right] \\ &= N^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \left[\sum_{n, \bar{\mathbf{R}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \bar{\mathbf{R}}} \varphi_n(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}}) \right] \\ &= N^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.27)$$

Assim, mostramos que a função de onda da aproximação *tight-binding*, tem a forma de uma onda de Bloch.

1.7 O Modelo de Anderson

Os primeiros modelos para sólidos os consideravam como sendo constituídos por átomos em uma estrutura periódica perfeita. Mas todos os sólidos, sejam eles naturais ou artificiais, possuem algum tipo de desordem, esta podendo constituir-se de átomos intrusos na estrutura ou até mesmo por distorções da rede.

Com o avanço no estudo dos sólidos, o próximo passo foi investigar as propriedades eletrônicas dos materiais que não possuem a periodicidade na rede que estava presente nos modelos anteriores, em especial a localização dos estados eletrônicos, que parece desempenhar um papel proeminente nestas propriedades. O modelo básico para estes materiais, conhecidos como sólidos amorfos, foi proposto por P. W. Anderson.

Anderson mostrou que as funções de onda dos elétrons em sólidos amorfos não são estendidas como ondas de Bloch e sim localizadas em torno das desordens. Além disso, estimou a largura de desordem necessária para haver uma transição entre os estados estendidos e os localizados, esta transição ficou conhecida como transição de Anderson.

O Hamiltoniano do modelo de Anderson para uma cadeia de átomos possui um termo cinético, representado pelo hopping entre os sítios vizinhos da rede e um termo potencial que representa a energia em cada sítio. Para simular as desordens ao longo da rede, utiliza-se um potencial aleatório. O Hamiltoniano *tight-binding* fica:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (1.28)$$

onde ϵ_i representa o potencial aleatório, t_{ij} o termo de hopping que modela a interação entre os sítios i e j e $|i\rangle$ é o orbital atômico centrado no sítio i . As energias ϵ_i são distribuídas aleatoriamente num intervalo de largura W e o termo cinético diminui rapidamente com a distância entre os sítios $|i - j|$. A largura W é conhecida como força ou intensidade da

desordem e o seu valor controla a transição entre o comportamento metálico e o isolante. Anderson mostrou que a depender do valor da intensidade da desordem, pode haver uma supressão do transporte eletrônico. Esta transição é controlada por um valor de W chamado de valor crítico e indicado por W_c .

Os autoestados e autoenergias são encontrados através da equação de Schrödinger independente do tempo (equação de autovalores):

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.29)$$

É possível escrever as soluções desta equação, os estados estacionários, como combinações lineares dos orbitais atômicos:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \quad (1.30)$$

onde os autoestados $|i\rangle$ formam uma base ortogonal para o espaço das soluções do Hamiltoniano da equação (1.28) e c_i representa a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron no orbital $|i\rangle$.

Substituindo a equação (1.30) e o Hamiltoniano (1.28) na equação de autovalores (1.29), obtemos uma relação entre as amplitudes de probabilidade:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j \quad (1.31)$$

Os modelos cristalinos anteriores podem ser obtidos da última equação. Para o modelo de Bloch unidimensional, a intensidade de desordem será nula, de forma que as energias em todos os sítios são as mesmas e iguais a ϵ_0 , ou seja,

$$\epsilon_i = \epsilon_0, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (1.32)$$

Para uma cadeia onde considera-se apenas a interação entre os primeiros vizinhos, o *hopping* será não-nulo apenas para os sítios $i - 1$ e $i + 1$. Fazendo estas simplificações

obtemos:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=i-1, i+1} c_j. \quad (1.33)$$

Supondo soluções do tipo onda de Bloch, ou seja, tomando $c_n = c_0 e^{ikn}$, temos que:

$$E = \epsilon_0 + 2t \cos(k) \quad (1.34)$$

que é a relação de dispersão obtida para o modelo de Bloch unidimensional com potencial constante em cada sítio da rede e dado por ϵ_0 . A banda de energias permitidas neste caso é dada por:

$$\epsilon_0 - 2t < E < \epsilon_0 + 2t \quad (1.35)$$

A equação (1.35) nos diz que numa cadeia linear monoatômica, a largura da banda de energia é de $(E_0 + 2t) - (E_0 - 2t) = 4t$, e depende apenas do termo de interação entre os vizinhos, t . Obviamente, Anderson estudou o caso mais geral em seu modelo, tomando W e t diferentes de zero, o que torna o problema muito mais complexo. Seus resultados mostraram que se um sólido possui uma estrutura ordenada, então todos os estados eletrônicos serão do tipo onda de Bloch, e portanto, se estendem por toda a cadeia. Caso o sólido possua um certo grau de desordem, seja ela estrutural, deposicional ou de qualquer outra natureza, pode haver ou não transmissão da função de onda, dependendo da quantidade de desordem existente.

O fenômeno no qual a desordem localiza a função de onda é explicado através das interferências destrutivas sofridas por esta ao passar pelas barreiras aleatórias decorrentes do potencial.

O modelo de Anderson permitiu que se desse um salto a frente no estudo das propriedades eletrônicas dos sólidos. Desde sua proposição original, várias versões têm sido apresentadas fazendo com que a quantidade de trabalhos na área aumentasse bastante. Estes estudos têm sido favorecidos pelo avanço nas técnicas computacionais e experimen-

tais, que foram alavancadas através da produção de dispositivos microeletrônicos.

1.8 A teoria de escala e a transição de Anderson

O trabalho pioneiro sobre os efeitos da desordem na localização eletrônica foi publicado por P. W. Anderson em 1958. Anderson mostrou que a desordem induzia à localização eletrônica e quantificou a desordem necessária para a ausência de transporte em sistemas aleatórios [1]. Posteriormente, N. F. Mott em 1968, estudou as propriedades de transporte em materiais amorfos e definiu o conceito de *mobility edge* como sendo a energia que separa estados eletrônicos estendidos de estados localizados [3]. Em $T = 0$ e desprezando possíveis oscilações da rede, o *mobility edge* é a energia crítica que caracteriza a transição do estado metálico para o estado isolante. Esta transição é conhecida como transição metal-isolante (MIT - *metal-insulator transition*) induzida por desordem, ou transição de Anderson.

Em 1979, Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [2], obtiveram a dependência da transição metal-isolante com a dimensão do sistema. A hipótese básica desta teoria de escala é que a transição metal-isolante em $T = 0$ é controlada por apenas uma quantidade: a condutância generalizada g .

A teoria de escala foi utilizada por Thouless [4] na reformulação do modelo de Anderson. Na abordagem de Thouless, as unidades fundamentais da rede deixam de ser os sítios atômicos i , passando a ser caixas de volume L^d , onde d é a dimensão do sólido e L é a dimensão lateral da caixa. Cada caixa contém muitos sítios e o sólido é formado por várias caixas acopladas umas às outras. Os parâmetros característicos do modelo de Anderson, W e t , são mapeados respectivamente em ΔE , que representa o espaçamento médio entre os níveis de energia dentro de cada caixa, e em δE , o deslocamento causado por mudanças nas condições de contorno. A densidade de estados, $n(E)$ é dada em termos destas quantidades por:

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (1.36)$$

Utilizamos agora o princípio da incerteza de Heisenberg para relacionar a variação de energia δE e o tempo t_D necessário para um pacote de onda difundir-se até os contornos da caixa de lado L :

$$\delta E \cdot t_D = \hbar. \quad (1.37)$$

Considerando que o elétron difunde-se através de um movimento Browniano dentro da caixa, podemos escrever:

$$t_D = \frac{L^2}{D}, \quad (1.38)$$

sendo D a constante de difusão. Usando a relação de Einstein entre a condutividade σ e as propriedades de difusão:

$$\sigma = e^2 D n(E). \quad (1.39)$$

Combinando esta equação com as Eqs. (1.38) e (1.39), obtemos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}. \quad (1.40)$$

A razão $\Delta E/\delta E$ é tomada como sendo a medida da força da desordem no sistema, análoga a razão W/t no modelo de Anderson tradicional. Estados estendidos são sensíveis às mudanças nas condições de contorno ($\frac{\Delta E}{\delta E} < 1$), enquanto estados localizados não são ($\frac{\Delta E}{\delta E} > 1$).

O parâmetro de desordem, g^{-1} , é dependente da escala e é definido como:

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.41)$$

Substituindo as Eqs. (1.36) e (1.40) em (1.41), obtemos a dependência de escala para o parâmetro g :

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2}. \quad (1.42)$$

Como a equação (1.40) é válida apenas no limite de estados estendidos, a equação (1.42) também só é válida para este limite. O termo σL^{d-2} é a definição da condutância de um cubo de dimensão d , lado L e condutividade σ . Desta forma, fica claro que $g(L)$ é uma condutância generalizada em unidades de e^2/\hbar . A teoria de escala para a transição de Anderson exprime como a função g escala com o comprimento característico L do sistema.

Consideremos agora um sistema de tamanho L_0 , composto por caixas de volume L_0^d . Sua condutância generalizada é

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)}. \quad (1.43)$$

Dado g_0 em uma escala de comprimento L_0 , a relação de escala permite encontrar g numa escala $L = bL_0$. Os volumes das caixas nesta nova escala de comprimento são facilmente encontrados em função dos comprimentos das caixas originais L_0 e do fator de escala b :

$$V = (bL_0)^d. \quad (1.44)$$

Portanto, a condutância generalizada é completamente determinada por uma função de escala $f(g_0, b)$. Sendo b uma transformação contínua, ou seja, $b = 1 + \epsilon$, onde $\epsilon \ll 1$, o comportamento de escala de g pode ser determinado pela função de escala diferencial $\beta(g)$, dada por:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.45)$$

A Fig. (1.2), proposta por Abrahams e colaboradores [2], mostra o comportamento da função $\beta(g)$, definida na equação (1.45). Para $\beta > 0$, a condutância generalizada g

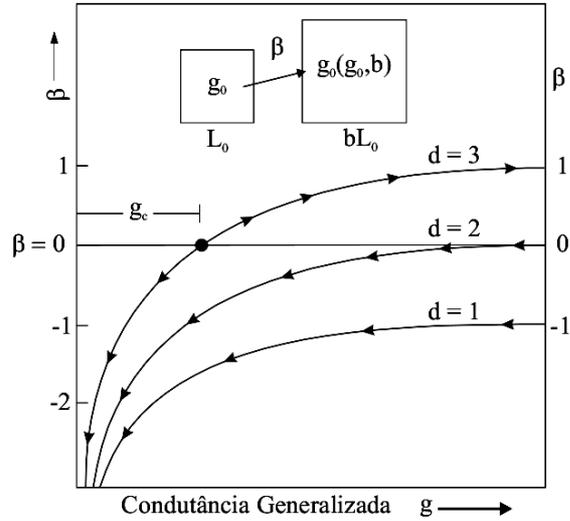


Figura 1.2: Comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para uma, duas e três dimensões apresentado por Abrahams e colaboradores em 1979.

crece com o crescimento de L , caracterizando um comportamento metálico; para $\beta < 0$, a função g decresce com o crescimento de L , indicando um comportamento isolante. O comportamento de $\beta(g)$ é determinado pela observação de seus limites assintóticos. Como a equação (1.42) é válida no limite macroscópico de estados estendidos, temos:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.46)$$

Mais explicitamente:

$$\beta(g \rightarrow \infty) = \begin{cases} +1 & \text{para } d = 3 \\ 0 & \text{para } d = 2 \\ -1 & \text{para } d = 1 \end{cases} . \quad (1.47)$$

Para g pequeno, ou seja, $g \ll 1$, o modelo de Anderson prevê que os estados eletrônicos são exponencialmente localizados, como mostra a Fig. (1.2). Deste modo, nos contornos de cada caixa de lado L , a amplitude da função de onda de um elétron localizado no interior da caixa é $e^{-\gamma L}$, onde γ é o expoente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização λ). Como o acoplamento entre as caixas possui a mesma dependência

exponencial com L , a condutância generalizada também decai exponencialmente ($g(L) \propto e^{-\gamma L}$), e da equação (1.45),

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g, \quad (1.48)$$

de forma que

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = -\infty, \quad (1.49)$$

como mostrado na Fig. (1.2), independentemente da dimensão d do sistema.

Assumindo que $\beta(g)$ é monotônica entre os limites $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$, reproduzimos o comportamento da Fig. (1.2). Para $d = 1$ e $d = 2$ o diagrama de fluxo nos mostra que g diminui com o crescimento de L . Para $d = 3$, temos um ponto fixo instável em $\beta = 0$ com $g = g_c$. O valor crítico, g_c separa a região de forte acoplamento e baixa desordem ($g < g_c$), onde os estados são estendidos, da região de fraco acoplamento e forte desordem ($g > g_c$), onde os estados são localizados. O diagrama resume a idéia central da teoria de escala: em $d = 1$ e $d = 2$ não existe transição metal-isolante, diferentemente do caso $d = 3$.

O comprimento de localização λ e a condutividade σ apresentam comportamento tipo lei de potência quando a energia está próxima da energia crítica de transição (*mobility edge*):

$$\lambda \propto (E - E_c)^\nu \sigma \propto (E - E_c)^s.$$

Estimou-se que $s = \nu = 1$ tanto através de técnicas diagramáticas, como fizeram Vollhard e Wolfle [5], quanto através de expansão em $d + \epsilon$, como fez Wegner [7]. Pesquisas recentes, entretanto, ao considerarem correções na teoria de escala, obtiveram um valor mais acurado para ν ($\approx 1,57$) [8, 9, 10, 11]. Como exemplos de experimentos nesta área podemos citar aqueles realizados em silício dopado com fósforo ou bário [12, 5, 13, 14, 15]. Em tais experimentos a desordem advém das posições aleatórias dos átomos dopantes. A largura de desordem é controlada através da concentração de dopantes ou da aplicação de

um campo.

1.9 Correlações no modelo de Anderson

A teoria de escala prevê que para o modelo de Anderson todos os estados eletrônicos para sistemas de baixa dimensionalidade ($d \leq 2$) serão localizados, independentemente do grau de desordem. Outra previsão da teoria é uma transição de Anderson para sistemas de dimensão $d = 3$ em determinado valor crítico, W_c , da largura de desordem. No entanto, recentemente surgiram vários trabalhos que indicam uma violação da teoria de escala, pois demonstram a existência da transição metal-isolante para sistemas desordenados de baixa dimensionalidade. A explicação mais aceita para este fenômeno é que correlações na desordem sejam responsáveis pelos estados estendidos que permanecem.

Em 1976, G. Theodorou e M. H. Cohen ao analisarem modelos *tight-binding* para cadeias unidimensionais com desordem nos termos fora da diagonal do Hamiltoniano (amplitudes de *hopping* aleatórias), mostraram que os estados no centro da banda eram estendidos [16]. No ano seguinte, L. Fleishman e D. C. Licciardello examinaram a natureza dos estados de energia zero em sistemas unidimensionais com desordem nos termos fora da diagonal do Hamiltoniano e mostraram que o comprimento de localização diverge para este valor da energia. No entanto, devido à influências de flutuações, a função de onda do elétron acaba tornando-se localizada, com comportamento assintótico $\psi(r) \sim \exp^{-\alpha\sqrt{r}}$, apesar da divergência do comprimento de localização, diferindo do modelo de Anderson original, onde as funções de onda eram exponencialmente localizadas. Isto faz com que o valor médio do coeficiente de transmissão, que está relacionado à condutividade σ , vá a zero no limite termodinâmico [17].

Em 1989, novamente através de estudos do modelo de Anderson com Hamiltoniano *tight-binding*, desta vez com desordem tanto nas energias do sítio quanto nos termos de *hopping*, J. C. Flores mostrou que tais sistemas podem apresentar uma energia crítica E_c para a qual o estado eletrônico permanece estendido caso as desordens na diagonal e fora da diagonal sejam correlacionadas de uma maneira particular[18]. Neste mesmo ano, D.

H. Dunlap, K. Kundu e P. Phillips, ao pesquisarem a dinâmica eletrônica em sistemas com desordem correlacionada tanto nas energias do sítio quanto no *hopping*, perceberam que pode haver uma delocalização de um pacote de onda inicialmente localizado, independentemente da dimensão espacial do sistema [19]. Estas pesquisas mostraram uma dinâmica superdifusiva para a função de onda em sistemas unidimensionais, pois o deslocamento quadrático médio cresce com o tempo de propagação t segundo uma lei de escala $t^{3/2}$.

M. Griniasty e S. Fishman [20] usaram uma abordagem um pouco diferente e estudaram o problema da localização em sistemas unidimensionais com um pseudo-potencial randômico, os quais apresentam um comportamento intermediário entre o caso periódico e o caso aleatório. O pseudo-potencial utilizado era da forma:

$$\epsilon_n = \lambda \cos(\pi\alpha|n|^\nu), \quad (1.50)$$

onde n é o índice que indica a posição do sítio.

Eles observaram que o caráter metal-isolante do modelo dependia dos valores dos parâmetros que definem o potencial:

- para α racional o comportamento é de um sólido cristalino;
- para α irracional,

- e $\nu \geq 2$, todos os estados são localizados com comprimento de localização semelhante ao modelo com potencial totalmente aleatório;

- e $0 < \nu \leq 1$, existem estados estendidos e estados localizados, com *mobility edge* (energia que divide estados localizados de estendidos) para $\lambda < 2$. No centro da banda de energia ($|E| < 2 - \lambda$) existem estados estendidos e nos extremos ($2 + \lambda > |E| > 2 - \lambda$) os estados são localizados. Para $\lambda > 2$, todos os estados são localizados.

- e $\nu > 1$, todos os estados fora do centro da banda são localizados, mesmo com comprimento de localização consideravelmente grande [21].

Em 1990, D. H. Dunlap, H. L. Wu e P. Phillips estudaram uma liga binária, através de um Hamiltoniano de Anderson [22]. Nesta cadeia, as energias dos sítios podem assumir

os valores ϵ_a e ϵ_b com probabilidades p e $1 - p$ respectivamente, e os sítios de energia ϵ_a aparecem sempre aos pares. Os termos de *hopping* entre os primeiros vizinhos é constante e igual a t . Observou-se que se $-2t < \epsilon_a - \epsilon_b < 2t$, o sistema apresenta uma energia ressonante onde a função de onda é delocalizada e o pacote de onda evolui de forma superdifusiva com $t^{3/2}$. Porém, se $|\epsilon_a - \epsilon_b| = 2t$, a evolução do pacote de onda é difusiva e o deslocamento quadrado médio é linear com o tempo. Em qualquer outro regime a função de onda é exponencialmente localizada. Outros modelos de dímeros, com Hamiltoniano *tight-binding*, foram formulados e apresentaram em geral algumas energias ressonantes onde a função de onda deixa de ser localizada para se espalhar por toda a cadeia.

Hilke foi o primeiro a introduzir um modelo de Anderson com desordem diluída em 1997 [23]. O modelo era composto por duas cadeias interpenetrantes, onde a desordem era inserida em apenas uma das cadeias (cadeia de Anderson), enquanto a outra possuía potenciais constantes. Devido a simetria remanescente na cadeia não-aleatória, surgem energias ressonantes, para as quais o elétron está em um estado estendido. A quantidade destas energias ressonantes é independente do tamanho do sistema; isto levou a conjectura de que estes estados estendidos ressonantes em nada interfeririam no transporte eletrônico. A presença de modos ressonantes delocalizados foi experimentalmente demonstrada em polianilina dopada [22] e em superestruturas semicondutoras aleatórias do tipo dímero [24]. Estados ressonantes estendidos foram também reportados em ligas semicondutoras binárias com desordem diluída [25], bem como em cadeias harmônicas aleatórias com desordem diluída na distribuição de massas [26]. Além disso, previu-se teoricamente que sistemas unidimensionais com desordem livre de escala e de longo alcance permitiriam a presença de *mobility edges* com intervalo de energia finito de estados delocalizados, previsão confirmada experimentalmente em guias de micro-ondas aleatórios.

O modelo de Anderson diluído foi estendido para incluir uma função de diluição geral que define as energias *on-site* para cada segmento não-aleatório [27]. Através de uma abordagem de dizimação, foi demonstrado que o número de estados ressonantes estendidos depende fortemente do tamanho dos segmentos diluidores e das simetrias da função

diluidora.

Modelos de Anderson unidimensionais com desordem correlacionada vêm sendo amplamente estudados, visto que estes apresentam estados eletrônicos estendidos [18, 22], propriedade não usual para sistemas desta dimensão, devido a teoria de escala. Nestes modelos de baixa dimensionalidade, a presença de desordem de curto-alcance induz o aparecimento de energias ressonantes, para as quais os estados eletrônicos são estendidos, formando um grupo de medida nula [22]. Entretanto, para correlações de longo-alcance, a ocorrência de uma transição metal-isolante torna-se possível em uma dimensão [28, 29]. Efeitos relacionados à presença de correlações de longo-alcance em sistemas desordenados têm sido amplamente analisados. Em 1998, Russ e colaboradores [30], apresentaram um modelo de Anderson unidimensional onde as energias dos sítios possuíam uma correlação dada por $C(l) \propto \langle \epsilon_n \epsilon_m \rangle \propto l^{-\gamma}$, sendo γ um parâmetro. O que observou-se é que para γ positivo todos os estados são localizados. Contudo, o comprimento de localização diverge quando γ tende a zero. F. A.B. F de Moura e M. L. Lyra [31] estudaram em 1998 um modelo de Anderson unidimensional com desordem diagonal e correlações de longo-alcance. No modelo, os potenciais nos sítios são dados pelo traço de um movimento Browniano fracionário, cuja densidade espectral é dada por:

$$S(k) \propto \frac{1}{k^\alpha}, \quad (1.51)$$

onde $S(k)$ é a transformada de Fourier da função de correlação de dois sítios, $\langle \epsilon_n \epsilon_m \rangle$. Os potenciais nos sítios são dados por:

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^{N/2} \left[k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos \left(\frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right), \quad (1.52)$$

com N representando o número de sítios e ϕ_k representando $N/2$ fases independentes e aleatórias, distribuídas uniformemente no intervalo $[0, 2\pi]$.

O comportamento deste sistema depende do valor do expoente α . Utilizando um formalismo de grupo de renormalização, F. A.B. F de Moura e M. L. Lyra mostraram que,

para $\alpha > 2$, este sistema exhibe estados estendidos no centro da banda, separados dos estados localizados por dois *mobility edges*. Pela primeira vez uma verdadeira transição metal-insolante em sistemas unidimensionais foi apresentada. Vários outros trabalhos que incluem correlações de longo-alcance em sistemas de baixa dimensionalidade têm sido propostos [29, 32, 33, 34, 35]. Por exemplo, o estudo de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados [40m] e trabalhos que indicam que as correlações de longo-alcance são responsáveis pelo transporte eletrônico no DNA [34, 36, 37]. Oscilações de Bloch em cadeias unidimensionais com desordem correlacionada de longo-alcance, onde o elétron é sujeito a um campo elétrico uniforme [35], foram encontradas para um pacote de onda inicialmente gaussiano, e a largura de banda de estados estendidos encontrada estava de acordo com a previsão teórica a campo nulo. Portanto, correlações na desordem têm sido consideradas como sendo um dos mecanismos básicos para a quebra da localização em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade.

2

TRANSPORTE ELETRÔNICO NO DNA

2.1 Introdução

Pesquisadores têm se voltado cada vez mais para o estudo do DNA, como atestam inúmeros sequenciamentos de genoma, com destaque para o genoma humano, modificações genéticas em várias espécies e, em nossa área de interesse podemos citar a síntese, caracterização e estudo das propriedades eletrônicas de sistemas baseados na molécula de DNA. Estas pesquisas têm envolvido tanto físicos quanto biólogos, pois existe a possibilidade do desenvolvimento de dispositivos eletrônicos baseados no DNA, como também há a sugestão de que a transferência de elétrons no DNA possa ser biologicamente importante. Como exemplo podemos citar a existência de evidência direta [38] de que a enzima MutY, faz parte de alguma forma de transferência de elétrons como parte do processo de reparo do DNA [39]. Este fato é consistente com estudos nos quais uma corrente elétrica aplicada no DNA mostra que regiões danificadas têm comportamento eletrônico significativamente diferente de regiões saudáveis [38]. Uma possível aplicação para esta descoberta seria a identificação de regiões do DNA com mutações e, no futuro, sua possível correção.

Naturalmente o DNA é encontrado em soluções líquidas, e portanto, admite-se

experimentalmente duas abordagens: pode-se estudar a molécula em solução ou em ambientes artificialmente secos. Em experimentos de soluções líquidas, o DNA é processado para hospedar uma molécula doadora e outra receptora em diferentes sítios ao longo do seu eixo. Desta forma, experimentos são feitos variando-se as moléculas doadoras/receptoras, a distância e a sequência de DNA entre estas moléculas. Experimentos com DNA seco também têm sido executados nos últimos anos. Os resultados têm se mostrado bastante variáveis, a depender do método de secagem do DNA, da natureza dos dispositivos usados para medir a condutividade e da sequência e comprimento do DNA. O DNA já foi descrito como isolante [41, 42], condutor Ohmico [43, 44, 45, 46, 47] e semicondutor [48].

Apesar da falta de consistência para as propriedades eletrônicas do DNA, em uma coisa os experimentos concordam: o meio em que o DNA se encontra influi drasticamente em suas propriedades estruturais, químicas e, provavelmente eletrônicas. Estudos teóricos e experimentais têm mostrado que a temperatura e o tipo de solução em que o DNA está envolto têm um papel significativo em sua estrutura e forma [49, 50, 51].

Dentro do contexto do transporte eletrônico no DNA, tem havido um interesse crescente no estudo de sistemas aleatórios correlacionados com uma topologia de escada, devido à sua similaridade com a estrutura de fita dupla (*double-strands*) do DNA e sua aplicação potencial no desenvolvimento de dispositivos bioeletrônicos, já que estudos mostram que o DNA pode servir como fio, transistor, *switch* ou retificador, dependendo de suas propriedades eletrônicas [52, 53, 54]. Escadas aleatórias de dois canais têm, portanto, sido consideradas uma classe interessante de modelos no qual correlações podem influenciar fortemente nas propriedades eletrônicas. Foi demonstrado que as correlações entre as fitas da escada, associadas ao emparelhamento de bases nitrogenadas no DNA, e as correlações *intra-strand* favorecem o transporte eletrônico sobre segmentos maiores quando comparado com cadeias aleatórias sem correlação [37, 40]. Entretanto, todos os estados permanecem exponencialmente localizados e o transporte por longas distâncias não ocorre.

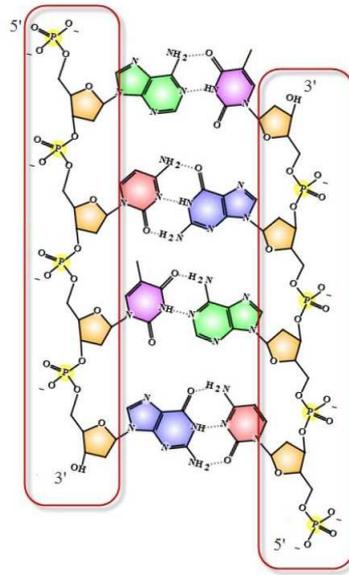


Figura 2.1: Desenho esquemático de um segmento de DNA com o *backbone* em destaque.

2.2 A Molécula de DNA

O DNA (do inglês Deoxyribonucleic acid) é a molécula responsável por armazenar as informações necessárias para o desenvolvimento e funcionamento de todos os seres vivos, com a exceção de alguns vírus. O DNA é um longo polímero com uma estrutura em dupla hélice (Fig.2.1) formado por unidades que se repetem chamadas nucleotídeos. Estas unidades são compostas por fosfatos, uma molécula de açúcar e uma base. Um nucleotídeo tem um comprimento de cerca de 0,34 nm. Embora sejam muito pequenos, uma molécula de DNA pode ser bastante grande, pois contém centenas de milhares destas unidades fundamentais.

A parte do nucleotídeo formada por uma molécula de açúcar e grupos de fosfatos compõe o chamado *backbone*, a parte do DNA que impede que a molécula se desfaça (Fig.2.1). Enquanto a base é responsável por ligar os dois filamentos do DNA. Existem quatro possíveis bases nitrogenadas, a saber: adenina (A), citosina (C), guanina (G) e timina (T). Estas bases são divididas em dois grupos: purinas e pirimidinas, adenina e guanina são purinas, enquanto citosina e timina são pirimidinas. Cada base em um dos filamentos do DNA junta-se a apenas uma outra base específica no outro filamento,

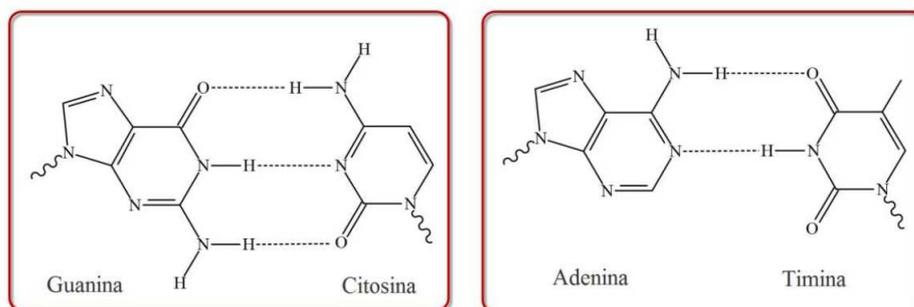


Figura 2.2: Pontes de hidrogênio entre as bases que formam o DNA.

desta forma, adenina junta-se a timina, enquanto guanina junta-se a citosina. O que está ocorrendo é a formação de ligações de hidrogênio entre purinas e pirimidinas. Como as ligações de hidrogênio são fracas quando comparadas com ligações covalentes, os filamentos de DNA podem ser facilmente separados, através de esforço mecânico ou do aumento da temperatura. Esta separação e uma posterior união, executam um papel crucial na reprodução do DNA.

Os dois pares de base possuem um número diferente de ligações de hidrogênio; AT possui duas e CG, três (Fig.2.2). DNA com alta concentração de CG são mais estáveis, mas ao contrário do que possa parecer, não por causa do número maior de ligações de hidrogênio e sim devido a interações devido ao empilhamento de bases *stacking*.

O DNA pode ser danificado por uma série de fatores, que mudam a sequência de bases nitrogenadas ou quebram a dupla hélice. Tais fatores incluem agentes oxidantes e radiação eletromagnética, como raios X ou luz ultravioleta.

O DNA tem despertado interesse na construção de nanoestruturas. Este interesse decorre de suas propriedades de reconhecimento molecular, ou seja, o emparelhamento específico das bases nitrogenadas. Isto permite conectar partes do DNA baseando-se em sua sequência de bases. Desta forma, o DNA é usado como um material para a construção de estruturas, em vez de portador de informação genética.

2.3 Transporte Eletrônico no DNA

Devido às potenciais aplicações em nanoeletrônica, têm havido um interesse crescente tanto na síntese quanto na caracterização de moléculas baseadas em DNA com sequências periódicas de nucleotídeos, e na predição teórica das propriedades eletrônicas de estruturas moleculares modelo [55, 56, 57, 58, 59, 60]. Entre estas, moléculas com sequências binárias periódicas têm atraído bastante atenção devido à estrutura de banda especial composta de duas bandas principais de estados permitidos separadas por um *gap* de energia. Tal estrutura de banda é similar àquelas de semicondutores de estado sólido. Quando as bandas estão semipreenchidas, a presença do *gap* de energia dá a estas moléculas um caráter isolante intrínseco. A introdução de defeitos pode gerar estados dentro do *gap* e aumentar substancialmente a condutância, especialmente em moléculas finitas.

2.4 O Papel das Correlações e Acoplamento entre Cadeias

Visando revelar a verdadeira relevância de correlações de curto e longo alcance nas propriedades de sequências do tipo DNA, E.L. Albuquerque, M.L. Lyra e F.A.B.F. de Moura [40], estudaram numericamente a dinâmica do pacote de onda de um elétron em arranjos de segmentos de cadeia única ou dupla. As sequências de DNA foram modeladas considerando que seus quatro nucleotídeos seguiam duas sequências artificiais, a saber, a sequência quasiperiódica de Rudin-Shapiro, com correlação de longo alcance entre os pares e uma sequência aleatória com pares correlacionados, com as correlações de primeiros vizinhos do cromossomo 22 humano, que mostra um comportamento de correlação de curto alcance entre os pares.

Eles verificaram que o espalhamento anômalo de um pacote de onda de um elétron inicialmente localizado poderia ser explicado pelas correlações de curto alcance, sugerindo que a inclusão de apenas correlações intra-cadeia entre primeiros vizinhos na distribuição de nucleotídeos provê uma descrição adequada das propriedades eletrônicas do DNA. Além disso, ficou demonstrado que o acoplamento entre cadeias permite o transporte eletrônico

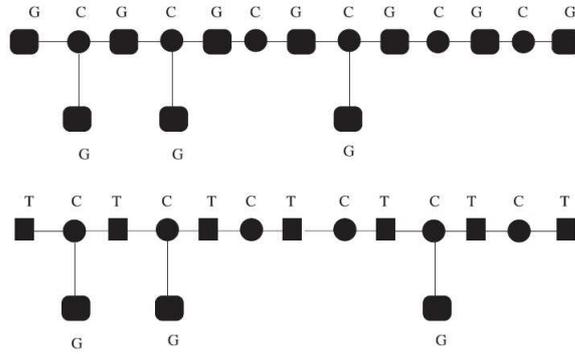


Figura 2.3: Representação esquemática de DNA com uma única fita mostrando as principais cadeias periódicas de bases alternadas (sequências CG e CT) com emparelhamento de bases diluído. As bases guanina (G) são acopladas lateralmente e de modo aleatório a uma fração p dos sítios citosinas (C).

sobre segmentos mais longos. Entretanto, tal aumento depende fortemente do acoplamento intra-cadeia e mais estudos considerando parâmetros de modelo mais realísticos se fazem necessários antes que se possa fazer qualquer inferência sobre a verdadeira relevância deste aumento do espalhamento eletrônico nas moléculas de DNA.

2.5 Efeito da Desordem Diluída

Em um trabalho posterior, E.L. Albuquerque, M.L. Lyra e F.A.B.F. de Moura [61], investigaram a natureza dos autoestados de um elétron no contexto de um modelo *tight-binding* em moléculas de DNA poly(CG) e poly(CT) com emparelhamento de bases diluído. O modelo considera que nucleotídeos guanina juntam-se às citosinas da cadeia principal com probabilidade p , Fig. (2.3). Eles demonstraram que este modelo pode ser mapeado exatamente no modelo de Anderson diluído, que consiste de duas cadeias interpenetrantes. Uma das cadeias é composta por unidades não-aleatórias: sítios G (guanina) para poly(CG) ou T (timina) para poly(CT). A segunda cadeia é uma sequência aleatória de sítios citosina com potencial *on-site* ϵ_C e sítios citosina renormalizados com potencial *on-site* efetivo dado por $\epsilon_C^* = \epsilon_C + V^2/(E - \epsilon_G)$.

Empregando um método recursivo para computar a densidade de estados, bem como o coeficiente de Lyapunov, e resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo para observar a evolução temporal de um pacote de onda inicialmente localizado, E.L. Albuquerque, M.L. Lyra e F.A.B.F. de Moura encontraram influências qualitativamente distintas do emparelhamento de pares diluído para cada modelo de cadeia. Para o caso poly(CG), a desordem introduzida pela diluição do emparelhamento de bases promoveu uma localização exponencial de todos os estados. Além disso, aumentou o *gap* entre as duas bandas principais de estados permitidos. Estes dois fatores realçam o caráter isolante desta molécula. Por outro lado, para moléculas poly(CT), existiu um modo ressonante com energia $E_0 = \epsilon_T$ que não foi afetado pela desordem e permaneceu estendido com um caráter do tipo Bloch. As duas bandas de energia, típicas da molécula poly(CT) pura, coalesceram em uma única banda para diluição intermediária antes de dividirem-se em três bandas. Portanto quando a energia de Fermi coincide com a energia de ressonância, tem-se um cenário típico que favorece o transporte eletrônico: uma densidade de estados sem *gaps* com estados estendidos próximos ao nível de Fermi. Se aproximarmos da energia de ressonância por valores menores, o comprimento de localização diverge. Por valores maiores que E_0 o comprimento de localização permanece finito. Esta característica implica que o transporte de buracos irá predominar sobre o transporte de elétrons.

Também foi apresentado a dinâmica de um pacote de onda de um elétron mostrando que a largura do pacote de onda na cadeia poly(CG) com emparelhamento de bases diluído, satura depois de um transiente inicial da escala de picossegundos. Para poly(CT), a dinâmica do pacote de onda desenvolve um *crossover* para um espalhamento assintótico difusivo devido a contribuições vindas dos estados efetivamente estendidos. A presença de um estado ressonante e a consequente dinâmica difusiva encontrada no poly(CT) com emparelhamento diluído também está presente em outras sequencias periódicas baseadas no DNA com emparelhamento aleatório. O ingrediente essencial é que a nucleobase lateralmente acoplada deve ser distinta da unidade da base da cadeia principal na qual o emparelhamento não é permitido.

O modelo tem algumas limitações. Por exemplo, considerou-se o caso de moléculas de DNA limpas e, portanto, não levou-se em conta os possíveis efeitos do ambiente, enquanto é sabido que a presença de moléculas de água e *counterions* [62] introduzem desordem adicional e, portanto, aumentam a localização de Anderson. Além disso, distorções geométricas podem também afetar fortemente o transporte de elétrons ao introduzirem desordem. Em particular, sabe-se que os termos de acoplamento entre as nucleobases sofrem grandes flutuações quando existem distorções estruturais [63]. Estes efeitos afetarão similarmente as moléculas poly(CG) e poly (CT) com emparelhamento diluído. Como resultado, o comprimento de localização médio será reduzido pela desordem devido ao ambiente e às distorções geométricas. Apesar disso, espera-se que a molécula poly(CT) ainda seja capaz de transportar elétrons por distâncias maiores que aquelas de sua contraparte poly(CG), pois o mecanismo de ressonância é robusto o suficiente para sustentar o estado ressonante mesmo para modelos estendidos que consideram a integral de transferência de bases emparelhadas menor que aquelas ao longo da cadeia principal, bem como orbitais adicionais representando o *backbone* de açúcar-fosfato.

Os resultados descritos acima apontam para a perspectiva de que segmentos do tipo poly(CG) com desordem diluída devem apresentar, em geral, propriedades de transporte eletrônico não usuais. Neste contexto, torna-se importante investigar estruturas do tipo dupla hélice com emparelhamento de bases e desordem diluída com apenas um dos tipos dos pares de nucleobases. A desordem pode ser introduzida através da orientação do par de base (CG ou GC). Para incluir a diluição da desordem, a inversão da orientação pode estar presente apenas em uma das sub-redes. Este será o tema do próximo capítulo que traz a contribuição inédita desta dissertação ao estudo das propriedades de transporte eletrônico em modelos baseados em sequências da molécula do DNA.

3

CADEIAS COM DESORDEM CORRELACIONADA E DILUÍDA

3.1 Introdução

Neste capítulo, introduziremos um novo modelo em forma de escada com desordem aleatória correlacionada utilizando o Hamiltoniano *tight-binding*. O modelo incorpora correlações de emparelhamento de bases entre cadeias e desordem diluída intracadeias. Consideraremos uma distribuição binária de energias *on-site* que resulta em uma densidade de estados com duas bandas de energia na ausência de desordem. Mostraremos que dois estados ressonantes simétricos persistirão com a presença de desordem. Demonstraremos que suas posições estão relacionadas com a diferença de energia do potencial binário. Além disso, veremos que apesar destes estados ressonantes estendidos aparecerem em energias específicas e corresponderem a um conjunto de medida nula do número total de estados no limite de escadas infinitas, eles fazem surgir um comportamento dinâmico anômalo. Enquanto a dispersão do pacote de onda mostra um espalhamento superdifusivo, sua função participação permanece finita. Este comportamento será relacionado ao surgimento de caudas do tipo lei de potência na distribuição do pacote de onda com um

cutoff superdifusivo. Caracterizaremos três expoentes importantes do tipo lei de potência envolvidos em tal dinâmica superdifusiva e mostraremos que eles satisfazem uma relação de escala.

3.2 Modelo e Formalismo

Consideraremos um modelo *tight-binding* para um elétron restrito a se mover em uma escada de dois canais com *hopping* entre primeiros vizinhos. Considerando um orbital por sítio, o Hamiltoniano pode ser escrito no formalismo de segunda quantização como:

$$H = \sum_n \epsilon_n c_n^\dagger c_n + t \sum_n c_n^\dagger c_{n+1} + t \sum_n c_{n+1}^\dagger c_n, \quad (3.1)$$

onde,

$$c_n = \begin{pmatrix} c_{n,+1} \\ c_{n,-1} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

com $c_{n,s}$ e $c_{n,s}^\dagger$ sendo os operadores de criação e aniquilação fermiônicos usuais agindo no sítio n da cadeia de cima ($s = +1$) e de baixo ($s = -1$) da escada. A matriz de acoplamento entre cada par da cadeia é dada por

$$\epsilon_n = \begin{pmatrix} \epsilon_{n,+1} & V \\ V & \epsilon_{n,-1} \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

onde $\epsilon_{n,s}$ é a energia *on-site* no n -ésimo sítio da cadeia s . V corresponde à amplitude de *hopping* entre cadeias para o par de sítios da escada na posição n . A amplitude de *hopping* ao longo de cada cadeia será considerada como independente do sítio e pode ser escrita na forma

$$t = \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & t \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

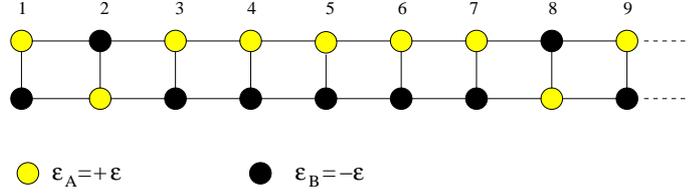


Figura 3.1: Representação ilustrativa do modelo de escada aleatório considerado com correlações entre cadeias e desordem intracadeia diluída. Cada par é composto de um dímero com energias *on-site* distintas $\epsilon_A = +\epsilon$ e $\epsilon_B = -\epsilon$. Na subcadeia ímpar os dímeros têm todos a mesma orientação (sítio *A* na cadeia superior e sítio *B* na cadeia inferior). Na subcadeia par, uma fração p dos dímeros têm suas orientações invertidas (dímeros 2 e 8 nesta figura).

Restringiremos nossa análise numérica para o caso particular onde $V = t$ (amplitude de *hopping* entre e intracadeias iguais). O caso geral no qual $V \neq t$ não traz nenhuma característica qualitativamente nova no que concerne às propriedades estacionárias e dinâmicas eletrônicas. Além disso, usaremos unidades de energia nas quais $V = t = 1$. Os sítios de pares de base da escada serão considerados como compostos por dímeros com duas energias distintas, que serão escolhidas como $\pm\epsilon$ sem qualquer perda de generalidade. Esta característica introduz correlações na distribuição das energias dos sítios de cada cadeia da escada ($\epsilon_{n,+1} = -\epsilon_{n,-1}$) similar às correlações entre cadeias encontradas entre os pares de nucleotídeos de moléculas sintéticas do tipo DNA poly(C)-poly(G). Além disso, introduzimos uma distribuição de desordem diluída das energias *on-site* ao longo das cadeias da escada. Nas posições ímpares ($n = 2j - 1$, $j = 1, 2, 3, \dots$) ao longo da escada, os pares de dímeros terão a mesma orientação, com o sítio na cadeia de cima tendo energia $\epsilon_{2j-1,+1} = \epsilon$ e o sítio na cadeia de baixo tendo $\epsilon_{2j-1,-1} = -\epsilon$. A desordem estará presente apenas na subescada correspondente às posições pares ($n = 2j$, $j = 1, 2, 3, \dots$). Neste subsistema, uma fração p dos pares de base será escolhida aleatoriamente para ter sua orientação invertida de tal maneira que $\epsilon_{2j,+1} = -\epsilon$ enquanto $\epsilon_{2j,-1} = \epsilon$. A fração restante $(1 - p)$ dos pares de base manterão a mesma orientação do subsistema ímpar. Logo, o modelo incorpora correlações entre cadeias e desordem diluída, ingredientes que devem influenciar fortemente na localização de Anderson e nas propriedades dinâmicas, como exploraremos abaixo. A Fig. (3.1) mostra uma representação ilustrativa da topologia do modelo de escada a que

estamos nos referindo na qual dois pares de base da sub-rede par tiveram suas orientações invertidas.

No caso particular em que $p = 0$ a escada é composta por dímeros com a mesma orientação. Enquanto que $p = 1$ corresponde a uma escada na qual os dímeros têm uma orientação alternada ao longo da escada. Nestes limites livres de desordem, a relação de dispersão e a densidade de estados (DOS) resultante pode ser calculada analiticamente. Para os valores intermediários de p , a DOS pode ser numericamente obtida através de uma diagonalização direta do Hamiltoniano da escada.

A presença de desordem causa uma localização de Anderson dos autoestados de energia de sistemas quasi-unidimensionais, exceto em ressonâncias eventuais que surgem devido à correlações especiais de curto-alcance na distribuição de desordem como, por exemplo, emparelhamento do tipo dímero e diluição. Uma quantidade padrão utilizada para quantificar o grau de localização é o coeficiente de Lyapunov Γ , que é o inverso do comprimento de localização λ . O coeficiente de Lyapunov pode ser obtido explorando o decaimento exponencial da função de Green de dois pontos como [37, 40, 64]:

$$\Gamma \equiv \frac{1}{\lambda} = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N} \ln |G_{1,N/2}^\dagger(E)|^2, \quad (3.5)$$

onde $G_{1,N/2}^\dagger$ é o operador função de Green entre o primeiro e o último par de sítios da escada. Este operador pode ser numericamente obtido através de um processo de decimação. O coeficiente de Lyapunov é finito para estados exponencialmente localizados bem como fora da banda de energia. Estados delocalizados ou localizados do tipo lei de potência têm coeficiente de Lyapunov nulo no limite termodinâmico.

A natureza localizada/delocalizada dos autoestados de um elétron também influencia a dinâmica do pacote de onda eletrônico. No que se segue, também estudaremos a evolução temporal de um pacote de onda inicialmente localizado no modelo de escada considerado. A evolução temporal da função de onda é obtida através da ação do operador unitário de evolução temporal:

$$|\psi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\psi(0)\rangle = e^{-iH\Delta t}|\psi(0)\rangle, \quad (3.6)$$

onde $|\psi(\Delta t)\rangle$ é o estado do elétron no tempo Δt , $|\psi(0)\rangle$ é o estado inicial e H é o Hamiltoniano. Usaremos uma expansão de Taylor de alta ordem do operador de evolução:

$$U(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}. \quad (3.7)$$

O método pode ser usado recursivamente para obter a função de onda no tempo t . Nossos resultados foram obtidos usando $\Delta t = 0,5$ e a soma foi truncada em $n_0 = 20$. Este *cutoff* foi suficiente para manter a conservação de norma da função de onda ao longo de todo o intervalo de tempo considerado ($t \leq 10^6$). Este formalismo é mais rápido que métodos Runge-Kutta de alta ordem. Estaremos particularmente interessados em calcular a dispersão do pacote de onda $\sigma(t)$ (a raiz quadrada do deslocamento médio quadrático) definido por [33, 64, 65]:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{s=\pm 1} \sum_{i=1}^N [(i - i_0)^2] |c_{i,s}(t)|^2}, \quad (3.8)$$

e a função participação $P(t)$

$$P(t) = \frac{1}{\sum_{i,s} |c_{i,s}(t)|^4}, \quad (3.9)$$

onde os $c_{i,s}$'s são os coeficientes do vetor de onda expandidos na base dos estados de Wannier ($|\psi(t)\rangle = \sum_{i,s} c_{i,s}|i,s\rangle$). Note que $\sigma(t)$ varia de 0, para a função de onda confinada ao par de bases inicial, até um valor máximo proporcional a N , para uma onda uniformemente estendida sobre toda a cadeia. A função participação $P(t)$ varia de 1 até N nos mesmos limites [33, 64, 65]. A dispersão é sensível às caudas da distribuição do pacote de onda enquanto a função participação mede o número de sítios responsável pela maioria da contribuição à densidade da partícula.

Na próxima seção, descreveremos nossos principais resultados para as propriedades estacionárias e dinâmicas do modelo escada com correlações do tipo dímero e desordem diluída. Mostraremos que a presença de estados delocalizados ressonantes associados com a diluição da desordem é responsável por uma dinâmica atípica do pacote de onda na qual a dispersão do pacote de onda cresce subdifusivamente enquanto a função participação permanece finita. Uma análise de escala da distribuição do pacote de onda será fornecida para esclarecer a origem física das distintas dependências com o tempo das funções dispersão e participação.

3.3 Resultados

Começaremos com uma discussão sobre a DOS dos casos não-aleatórios limites, com $p = 0$ e $p = 1$ juntamente com o caso mais desordenado, no qual metade dos dímeros da sub-rede par tem sua orientação invertida aleatoriamente. Nos casos em que $p = 0$ e $p = 1$, a relação de dispersão pode ser calculada analiticamente. Para $p = 0$ (todos os dímeros com a mesma orientação), o modo com energia positiva é dado por:

$$E(k) = 2 \cos k + \sqrt{\epsilon^2 + 1}, \quad (3.10)$$

onde k é o número de onda ao longo da escada. Para $p = 1$ (dímeros com orientação alternada), a célula unitária é composta de um par de dímeros e, portanto, existem duas bandas com energia positiva cujas relações de dispersão são:

$$E(k) = \sqrt{\epsilon^2 + 1 + 4 \cos^2 k \pm 4 \cos k}. \quad (3.11)$$

A partir destas equações a DOS pode ser diretamente obtida através de $g(E) = \sum [1/(2\pi |dE/dk|)]$, onde a soma se estende sobre os modos eventualmente degenerados. A DOS resultante para estes dois casos são mostradas na Fig. (3.2) para o valor particular $\epsilon = 4$. Para $p = 0$ o *gap* entre as bandas positiva e negativa é $\Delta E = 2\sqrt{\epsilon^2 + 1} - 4 \approx 4,25$ enquanto a largura da banda é $\delta E = 4$. Para $p = 1$ o *gap* entre as bandas torna-se muito

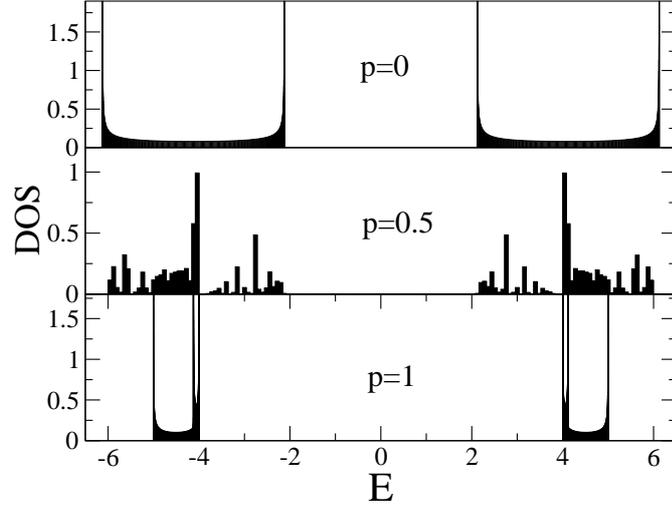


Figura 3.2: Densidade de estados (DOS) para o modelo de escada *tight-binding* com $\epsilon = 4$. Painel do topo: todos os dímeros têm a mesma orientação ($p = 0$). Painel inferior: os dímeros seguem uma orientação alternada ao longo da escada. O caso $p = 1/2$ corresponde à escada com desordem diluída: Dímeros na subcadeia ímpar tem a mesma orientação enquanto uma fração $p = 1/2$ dos dímeros da subcadeia par são escolhidos aleatoriamente para ter a orientação oposta. Note que o *gap* aumenta enquanto a largura da banda diminui com p .

maior $\Delta E = 2\epsilon = 8$ enquanto a banda de energia estreita-se $\delta E = \sqrt{\epsilon^2 + 9} - \epsilon = 1$. Na verdade, a banda de energia é uma superposição de bandas originadas de modos distintos. Uma singularidade de Van Hove adicional está presente em $E_r = \sqrt{\epsilon^2 + 1} \approx 4,12$ que delimita o fim de uma das bandas superpostas. Esta singularidade está associada com a simetria adicional da escada com dímeros alternados. É interessante notar que esta singularidade localiza-se exatamente na energia correspondente ao centro da banda da escada com dímeros completamente orientados ($p = 0$). Para a escada diluída aleatória obtivemos as autoenergias através de uma diagonalização direta de escadas com $N = 10000$ pares de base. 50 configurações de desordem distintas foram consideradas. A DOS resultante também é mostrada na Fig. (3.2). Obtivemos esta figura ao fazermos o histograma das auto-energias tomando pequenas janelas de tamanho 0,1. As grandes flutuações na DOS são típicas de sistemas que exibem localização de Anderson devida à ausência efetiva de repulsões de níveis. A maioria das singularidades de Van Hove acabam arredondadas devido a perda da simetria translacional introduzida pela desordem. Entretanto, a singularidade

em $E = \sqrt{\epsilon^2 + 1}$ desenvolve-se refletindo a invariância translacional subjacente da subrede ímpar não-aleatória.

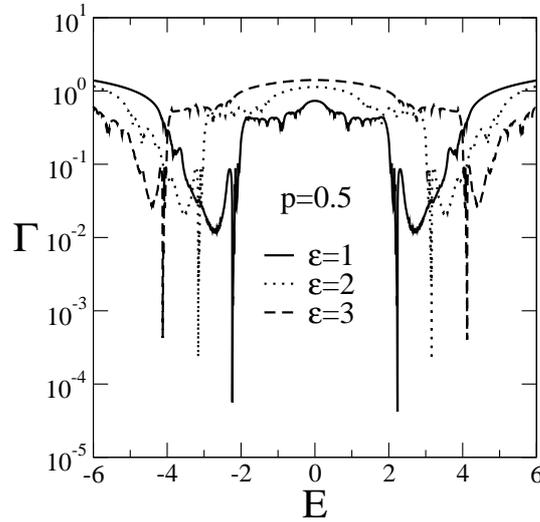


Figura 3.3: Coeficiente de Lyapunov versus energia obtido da dizimação da função de Green nas escadas com $N = 10^6$ pares de bases. Os dados são para escadas aleatórias diluídas com $p = 1/2$ e diferentes energias on-site dos dímeros. O coeficiente de Lyapunov anula-se em um par de energias simétricas, sinalizados por uma queda brusca na escala log. Estas correspondem a estados ressonantes delocalizados que não são sensíveis à desordem diluída subjacente.

A Fig. (3.3) mostra o espectro do expoente de Lyapunov para a escada de dímeros diluída com $p = 1/2$ e com diferentes valores da diferença entre as energias *on-site* dos dímeros. O expoente de Lyapunov é finito sobre quase toda a banda de energias. Isto é uma indicação de que os autoestados são exponencialmente localizados em sua maioria. O comprimento de localização típico ($\lambda = 1/\gamma$) é menor que 100 pares de base. Entretanto, um coeficiente de Lyapunov muito pequeno é encontrado em um par de energias ressonantes simétricas, assinalado por um mergulho pronunciado no espectro do coeficiente de Lyapunov. Estes modos ressonantes permanecem, portanto, estendidos mesmo na presença de desordem. Estes modos estão localizados nas singularidades de Van Hove em $\pm\sqrt{\epsilon^2 + 1}$, como mostra a Fig. (3.4). Esta característica pode ser entendida se observarmos que as autofunções correspondentes a estes modos ressonantes têm amplitudes nulas nos sítios dos dímeros da sub-rede par aleatória. Portanto suas energias devem consistir das autoenergias de um dímero isolado, que é exatamente dada por $\pm\sqrt{\epsilon^2 + 1}$.

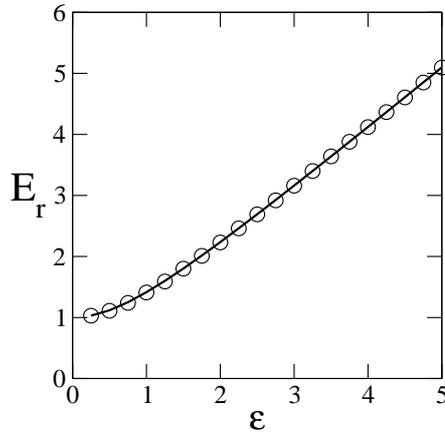


Figura 3.4: A energia ressonante positiva correspondente ao estado delocalizado em função da energia *on-site* do dímero ϵ . Os círculos foram obtidos através de cálculos numéricos. A linha sólida corresponde a auto-energia positiva de dímeros isolados $E = \sqrt{\epsilon^2 + 1}$.

O resultado acima mostra que os modos estendidos da escada de dímeros com desordem diluída estão localizados num par de energias ressonantes. Isto está de acordo com o resultado do modelo *tight-binding* unidimensional com desordem diluída análogo, que possui uma única energia de ressonância. O número de ressonâncias é igual ao número de cadeias acopladas com desordem diluída. Uma banda verdadeira de energias com estados estendidos aparece apenas no limite bidimensional [66]. Sendo assim, a presença de um número finito de ressonâncias não é capaz de promover uma transição metal-isolante verdadeira. Entretanto, a seguir, mostraremos que a presença destas ressonâncias gera uma evolução temporal atípica de um pacote de onda inicialmente localizado em um único sítio.

A Fig. (3.5) mostra a evolução temporal da função participação e da dispersão do pacote de onda. O tempo considerado foi longo o suficiente para ultrapassar o transiente inicial. Efeitos de borda são irrelevantes para esta escala de tempo. A função participação satura depois do transiente inicial mostrando que a principal contribuição para a densidade de probabilidade da partícula depende apenas de um número de sítios da ordem de 10^1 . Esta feição está diretamente relacionada com a natureza da maioria dos autoestados de uma partícula exponencialmente localizados. Por outro lado, a dispersão do pacote de onda mostra um crescimento assintótico superdifusivo $\sigma \propto t^z$, com $z = 0,60$. Isto indica que o pacote de onda deve desenvolver caudas que decaem vagarosamente e contribuem

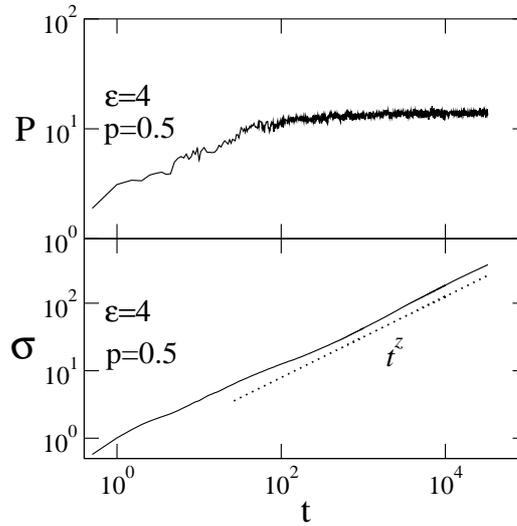


Figura 3.5: Evolução temporal da função participação e da dispersão do pacote de onda de um estado inicialmente localizado. Os parâmetros da escada aleatória diluída são $\epsilon = 4$ e $p = 1/2$. A função participação satura depois de um transiente inicial, enquanto a dispersão do pacote de onda continua a espalhar-se superdifusivamente. A linha reta corresponde ao comportamento assintótico $\sigma \propto t^z$, com $z = 0.60$.

para a dispersão mas não são relevantes para a função participação.

Para termos uma idéia mais clara da dinâmica do pacote de onda, mostramos na Fig. (3.6) a distribuição típica do pacote de onda depois de um longo tempo. O quadro principal mostra que a maior contribuição para a distribuição do pacote de onda (para uma média de 100 evoluções com distribuições de desordem distintas) é realmente concentrada ao redor de um pequeno segmento da escada, concordando com a função participação medida. No *inset*, mostramos dados colapsados da cauda da distribuição do pacote de onda para tempos de evolução diferentes. Estes dados exibem um decaimento tipo lei de potência até uma distância de *cutoff* x_m da posição inicial depois do qual o decaimento exponencial aparece. O *cutoff* x_m na verdade delimita a frente do pacote de onda. O colapso dos dados mostra que a cauda do pacote de onda obedece a forma de escala $|\Psi(t,x)|^2 = t^{-\gamma\phi} f(x/x_m)$, onde $x_m \propto t^\gamma$, com $\gamma = 0,8$ e $\gamma\phi = 1,20$. Portanto, a frente de onda avança superdifusivamente. A cauda com comportamento de lei de potência da distribuição do pacote de onda é escalada como $|\Psi(x = |i - i_0|, t)|^2 \propto x^{-\phi}$, com $\phi = 1,50$.

O comportamento temporal e de escala acima da distribuição do pacote de onda é

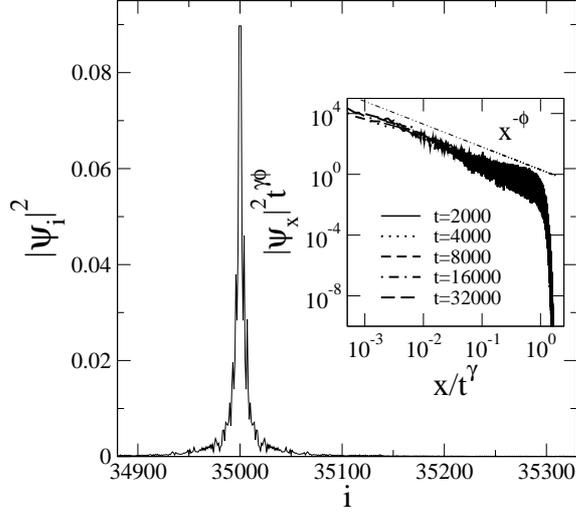


Figura 3.6: Média sobre 100 configurações de desordem distintas da distribuição do pacote de onda depois de um longo tempo. O estado inicial foi colocado no centro de uma cadeia com $N = 70000$ pares de base. Os parâmetros da escada são os mesmos que na Fig. (3.5). Note que a principal contribuição para a densidade da partícula vem de um estreito intervalo de sítios ao redor da posição inicial. O *inset* mostra dados colapsados da cauda da distribuição do pacote de onda calculados em tempos diferentes. Aqui $x = i - i_0$. Os dados são consistentes com uma forma de escala universal $\Psi(x,t) = t^{-\gamma\phi} f(x/x_m)$, onde a distância de *cutoff* $x_m \propto t^\gamma$ com $\gamma = 0.80$ e $\gamma\phi = 1.20(5)$. Antes do decaimento exponencial final, o pacote de onda desenvolve uma cauda do tipo lei de potência $|\Psi|^2 \propto x^{-\phi}$. Os expoentes de escala medidos fornecem $\phi = 1.50$.

consistente com o comportamento dinâmico distinto da função participação e da dispersão do pacote de onda. No regime de tempos longos, a função participação pode ser escrita como:

$$P(t) = P(x_0) + \left[\sum_{x_0}^{x_m(t)} (|\Psi'|^2 x^{-\phi})^2 \right]^{-1}, \quad (3.12)$$

onde x_0 é a distância característica depois da qual o decaimento tipo lei de potência aparece (da ordem de uns poucos pares de base) e $|\Psi'|^2$ é o coeficiente do decaimento assintótico com lei de potência da densidade do pacote de onda. Note que $P(t \rightarrow \infty)$ é independente do *cutoff* x_m para $\phi > 1/2$. Portanto o decaimento com lei de potência do pacote de onda com um expoente $\phi = 3/2$ é rápido o suficiente para manter a função participação finita. Por outro lado, o deslocamento médio quadrático do pacote de onda pode ser estimado por

$$\sigma^2(t) = \sigma^2(x_0) + \sum_{x_0}^{x_m(t)} x^2 [|\Psi'|^2 x^{-\phi}]. \quad (3.13)$$

Esta série converge apenas para $\phi > 3$. Portanto, a dispersão no presente caso será sensível ao *cutoff* do pacote de onda. Neste caso a dispersão escala como $\sigma \propto x_m^{(3-\phi)/2} \propto t^z$, com $z = \gamma(3 - \phi)/2$. Esta relação de escala é realmente satisfeita pelos expoentes medidos numericamente.

Em resumo, a presença de estado ressonantes estendidos decorrentes da natureza diuída da desordem tem uma forte influência na evolução temporal do pacote de onda eletrônico. Apesar destes estados representarem um grupo de medida nula dos estados eletrônicos permitidos, eles são responsáveis pelo alargamento superdifusivo do pacote de onda e pelo desenvolvimento de caudas do tipo lei de potência. Os expoentes característicos do pacote de onda estão em um regime no qual diferentes medidas da extensão espacial do pacote de onda apresentam comportamentos distintos. Enquanto a dispersão do pacote de onda cresce superdifusivamente, a função participação permanece finita.

4

CONCLUSÃO

Nesta dissertação introduzimos um modelo *tight-binding* de uma escada de dímeros correlacionados e com desordem diluída. Cada par de base da escada consiste de dois sítios diferentes com energias $\pm\epsilon$, medidas em unidades de amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos que acopla os sítios dos dímeros bem como os sítios ao longo das cadeias da escada. A escada é considerada com sendo composta de duas sub-redes interpenetrantes. Em uma delas todos os dímeros tem a mesma orientação. Na outra sub-rede, uma fração p dos dímeros têm sua orientação invertida. Portanto, o modelo combina características presentes em segmentos da molécula do DNA, tais como a estrutura de duas cadeias acopladas e com emparelhamento de bases, com características presentes em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada, representada pela presença da aleatoriedade em apenas uma sub-rede. Mostramos que a maioria dos autoestados de uma partícula tornam-se exponencialmente localizados, exceto por um par de estados ressonantes simétricos que são insensíveis à desordem subjacente. Estes estados têm auto-funções com amplitude nula na sub-rede aleatória e, portanto, suas energias correspondem às autoenergias de um dímero isolado.

Vimos que os estados ressonantes estendidos desempenham um papel relevante na dinâmica do pacote de onda de uma partícula. Um pacote de onda inicialmente localizado

evolui com o tempo desenvolvendo uma cauda com lei de potência e com a frente de onda avançando superdifusivamente. Descobrimos que a distribuição da cauda do pacote de onda decai como $|\Psi(x)|^2 \propto x^{-\phi}$, com $\phi = 1,50$ e x medido como a distância até a posição inicial. Além disso, a superdifusão da frente de onda é dada por $x_m \propto t^\gamma$, com $\gamma = 0,60$. A escala espacial e temporal do pacote de onda leva a um comportamento dinâmico distinto para a função participação e para a dispersão do pacote de onda. O expoente ϕ é grande o suficiente para manter a função participação assintótica finita. Portanto esta quantidade, comumente usada para caracterizar a extensão espacial de pacotes de ondas, não é sensível à presença dos estados ressonantes estendidos. Por outro lado, o expoente ϕ não é grande o suficiente para manter a dispersão do pacote de onda σ finita. Como consequência, esta cresce superdifusivamente como $\sigma \propto t^z$, com $z = \gamma(3 - \phi)/2 = 0,60$. Assim sendo, a dispersão do pacote de onda captura a existência dos estados ressonantes estendidos.

É interessante notar que a dinâmica do pacote de onda em cadeias desordenadas não-lineares foi anteriormente reportada como tendo exibido um regime no qual a dispersão do pacote de onda diverge enquanto a função participação permanece finita [67, 68]. Entretanto, este efeito tem uma origem física diferente associada com o *self-trapping* parcial do pacote de onda devido à não-linearidade. Aqui a divergência não simultânea da função participação e da dispersão resulta de um desenvolvimento de caudas com lei de potência na distribuição do pacote de onda. Como é sabido que a função de onda na vizinhança da transição de Anderson mostra caudas multifractais com lei de potência [69, 70, 71], seria interessante investigar a possibilidade de ter tal divergência não-simultânea da função participação e da dispersão em uma transição metal-isolante verdadeira induzida por desordem.

REFERÊNCIAS

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan, 1979 Phys. Rev. Lett. **42** 673; B. Kramer and A. MacKinnon, 1993 Rep. Prog. Phys. **56** 1469.
- [3] N. F. Mott and E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, (Clarendon Press, Oxford, 1971). Veja também N.F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor e Francis, London, 1974).
- [4] D. J. Thouless, Physics Reports **13**, 93 (1974).
- [5] B. Kramer e A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [6] N .W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid States Physics* (Saunders College, New York, 1976).
- [7] F. Wegner, Z. Phys. B 25, 327 (1976).
- [8] K. Slevin, T. Ohtsuki e T. Kawarabayashi, Phys. Rev. Lett. **84**, 3915 (2000).
- [9] K. Slevin e T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 (2001).
- [10] K. Slevin, P.Marko e T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett.**86**, 3594 (2001).
- [11] S. L. A. de Queiroz, Phys. Rev. B **63**, 214202 (2001).
- [12] D. K. Ferry e S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge, New York, 1997).

-
- [13] D. Belitz e T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 281 (1994).
- [14] G. A. Thomas e M. A. Paalanen, *Recent Developments in the Metal-Insulator Transition em Localization, Interaction and Transport Phenomena*, Spring Series in Solid-State Sciences. ed. B. Kramer, G. Bergmann e Y. Bruynseraede, **61** p. 77 (1984).
- [15] S. Bogdanovich, M. P. Sarachik e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 137 (1999).
- [16] G. Theodorou, M. H. Cohen, *Phys. Rev. B* **13**, 4957 (1976).
- [17] C. M. Soukoulis, e E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **24**, 5698 (1981).
- [18] J. C. Flores, *J. Phys. Condens. Matter.* **1**, 8471 (1989).
- [19] D. H. Dunlap, K. Kundu and P. Phillips, *Phys. Rev. B* **40**, 10999 (1989).
- [20] M. Griniasty e S. Fishman, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1334 (1988).
- [21] S. Das Sarma, Song He e X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2144 (1988).
- [22] D. H. Dunlap, H. L. Wu e P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990). H.L. Wu and P. Phillips, *ibid.* **66**, 1366 (1991).
- [23] M. Hilke, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, L367 (1997).
- [24] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999).
- [25] F. Domínguez-Adame , I. Gomez , A. Avakyan , D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, *Physica Status Solidi B-Basic Research* **221** (2): 633 (2000).
- [26] F.A.B.F. de Moura, M.L.Lyra, S.S. Albuquerque *Physica A*, **266** 465, (2005).
- [27] E. Lazo, M. E. Onell, *Physica B* **299** (2000) 173; *Phys. Lett. A* **283** (2001) 376-381.
- [28] F.M. Izrailev and A.A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
- [29] | H. Shima, T. Nomura and T. Nakayama, *Phys. Rev. B* **70**, 075116 (2005).
-

-
- [30] S. Russ, J. W. Kantelhardt, A. bunde, S. Havlin e I. Webman, *Physica A* **266**, 492 (1999).
- [31] F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998); *ibid.* **84**, 199 (2000).
- [32] G. Schubert, A. Weibe and H. Fehske, *Physica B* **359**, 361 (2005).
- [33] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo and M.L. Lyra, *Europhys. Lett.* **66**, 585 (2004).
- [34] B. Santos, L.P. Viana, M.L. Lyra and F.A.B.F. de Moura, *Solid. State Comun.* **138**, 585 (2006).
- [35] F.Domínguez.-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 197402 (2003).
- [36] P. Carpena, P. Bernaola-Galán, P.Ch. Ivanov e H.E. Stanley, *Nature* **418**, 955 (2002).
- [37] E. L. Albuquerque, M. L. Vasconcelos, M. L. Lyra e F.A.B.F de Moura, *Phys. Rev. E* **71**, 021910 (2005)
- [38] Boon, E., A. Livingston, N. Chmiel, S. David, and J. Barton. 2003. DNA-mediated charge transport for DNA repair. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 100:12543–12547.
- [39] Daphne Klotsa, Rudolf A. Römer and Matthew S. Turner. 2005. Electronic Transport in DNA. *Biophysical Journal.* **89**: 2187-2198.
- [40] E.L. Albuquerque, M.L. Lyra and F.A.B.F. de Moura, *Physica A* **370**, 625 (2006).
- [41] Braun, E., Y. Eichen, U. Sivan, and G. Ben-Yoseph. 1998. DNA-templated assembly and electrode attachment of a conducting silver wire. *Nature.* 391:775–778.
- [42] Lewis, J. P., T. E. Cheatham, E. B. Starikov, H. Wang, and O. F. Sankey. 2003. Dynamically amorphous character of electronic states in poly(dA)-poly(dT) DNA. *J. Phys. Chem. B.* 107:2581–2587.
-

-
- [43] Rakitin, A., P. Aich, C. Papadopoulos, Y. Kobzar, A. Vendeneev, J. Lee, and J. Xu. 2001. Metallic conduction through engineered DNA: DNA nanoelectric building blocks. *Phys. Rev. Lett.* **86**:3670–3673.
- [44] Asabaeva, A., and M. Tang. 2000. Electrical conductivity in oriented DNA. National Nanofabrication Users Network Newsletter. 56–57.
- [45] Fink, H.-W., and C. Schonenberger. 1999. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature*. bf 398:407–410.
- [46] Nakao, H., M. Gad, S. Sugiyama, K. Otobe, and T. Ohtani. 2003. Transfer-printing of highly aligned DNA nanowires. *J. Am. Chem. Soc.* **125**:7162–7163.
- [47] Okahata, Y., T. Kobayashi, K. Tanaka, and M. Shimomura. 1998. Anisotropic electric conductivity in an aligned DNA cast film. *J. Am. Chem. Soc.* **120**:6165–6166.
- [48] Porath, D., A. Bezryadin, S. Vries, and C. Dekker. 2000. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature*. **403**: 635–638.
- [49] Yu, Z., and X. Song. 2001. Variable range hopping and electrical conductivity along the DNA double helix. *Phys. Rev. Lett.* **86**:6018–6021.
- [50] Barnett, R. N., C. L. Cleveland, A. Joy, U. Landman, and G. B. Schuster. 2001. Charge migration in DNA: ion-gated transport. *Science*. **294**:567–571.
- [51] Bruinsma, R., G. Gruner, M. R. D’Orsogna, and J. Rudnick. 2000. Fluctuation-facilitated charge migration along DNA. *Phys. Rev. Lett.* **85**:4393–4396.
- [52] Endres, R. G., D. L. Cox, and R. P. Singh. 2004. The quest for highconductance DNA. *Rev. Mod. Phys.* **76**:195–214.
- [53] Dekker, C., and M. A. Ratner. 2001. Electronic properties of DNA. *Phys. World*. **14**:29–33.
- [54] Porath, D., G. Cuniberti, and R. Di Felice. 2004. Charge transport in DNA-based devices. In *Topics in Current Chemistry*, Vol. 237. Springer-Verlag, Berlin. 183–228.
-

-
- [55] Tippin D. B., Ramakrishnan B. and Sundaralingam M. 1997. *J. Mol. Biol.* **270** 247
- [56] Taniguchi M. and Kawai T. 2004. *Phys. Rev. E* **70** 011913
- [57] Taniguchi M. and Kawai T. 2006. *Physica E* **33** 1
- [58] Yoo K. H., Ha D. H., Lee J. O., Park J.W., Kim J., Kim J. J., Lee H. Y., Kawai T. and Choi H. Y. 2001. *Phys. Rev. Lett.* **87** 198102
- [59] Gutiérrez R., Mandal S. and Cuniberti G. 2005. *Nano Lett.* **5** 1093
- [60] Malyshev A. V. 2007. *Phys. Rev. Lett.* **98** 096801
- [61] F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra and E. L. Albuquerque. *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 075109
- [62] Voityuk A. A. 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 204904
- [63] Troisi A. and Orlandi G. 2002. *J. Phys. Chem. B* **106** 2093
- [64] W.S. Dias, F. A. B. F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho and M. L. Lyra, *Phys. Lett. A*, **374**, 3572 (2010).
- [65] S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and E. Lazo, *Physics Letters A*, **355**, 468 (2006)
- [66] M. Hilke, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 226403 (2003).
- [67] G. Kopidakis, S. Komineas, S. Flach, and S. Aubry, *Phys. Rev. Lett.* **100**, (2008) 084103.
- [68] Ch. Skokos, D.O. Krimer, S. Komineas, and S. Flach, *Phys. Rev. E* **79**, 056211 (2009).
- [69] M. Schreiber and H. Grussbach, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 607 (1991).
- [70] F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **55**, 9463 (1997).
- [71] A. Rodriguez, L.J. Vasquez and R.A. Römer, *Eur. Phys. J. B*, **67**, 77 (2009).
-