

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MANOEL PEREIRA DA SILVA JÚNIOR

**PERCOLAÇÃO QUÂNTICA EM CADEIAS DILUÍDAS COM ACOPLAMENTOS DE
LONGO ALCANCE**

MACEIÓ

2008

MANOEL PEREIRA DA SILVA JÚNIOR

**PERCOLAÇÃO QUÂNTICA EM CADEIAS DILUÍDAS COM ACOPLAMENTOS DE
LONGO ALCANCE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura

Co-orientador: Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

MACEIÓ

2008

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

S586p Silva Júnior, Manoel Pereira da.
Percolação quântica em cadeias diluídas com acoplamentos de longo-alcance /
Manoel Pereira da Silva Júnior, 2008.
50 f.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura.
Dissertação (mestrado em Física da Matéria Condensada) – Universidade
Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2008.

Bibliografia: f. 46-50.

1. Percolação quântica. 2. Cadeias diluídas. I. Título.

CDU: 530.145.3



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

“Percolação Quântica em Cadeias diluídas com
Acoplamentos de Longo Alcance”

por

Manoel Pereira da Silva Júnior

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

Maceió, 14 de março de 2008


Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Iram Marcelo Gléria


Prof. Samuel Silva de Albuquerque

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos a todos que tornaram possível a conclusão de mais uma etapa em minha vida acadêmica. Em especial, agradeço ao meu orientador, Prof. *Francisco A.B. Fidelis de Moura* e Ao Prof. *Marcelo L. Lyra* pelo acompanhamento e pela paciência e conhecimento desprendida a mim durante toda a realização deste trabalho.

Agradeço a todos os professores e funcionários do Instituto de Física que contribuíram com minha formação acadêmica. Em especial, Aos Profs. *Iram M. Gléria*, *Dilson P. Caetano*, *Francisco A.B. Fidelis de Moura* e Prof. *Marcelo L. Lyra*, pelas aulas ministradas durante o curso de mestrado.

Aos professores do CEFET-AL, em especial, aos Professores *Ednaldo Tenório* e *Carlos Argolo*, que com suas amizades, prestatividade e com seus grandes conhecimentos muito contribuíram com o início de minha vida profissional.

Aos amigos que conquistei durante estes anos no IF, obrigado pelos momentos de descontração, e pela ajuda nas horas difíceis, tenho a todos muita estima. Em particular, agradeço aos meus grandes amigos, *Círeco Rita*, *André de Moura*, *Caio Faustino*, *Bethoven dos Santos*, *Jorge Luis*, *Thais Freitas*, *Askery Alexandre* e *Samuel Albuquerque*, pessoas estas que hoje fazem parte de minha vida.

Aos meus familiares que vem me apoiando durante toda minha vida e que também fazem parte desta conquista, meu muito obrigado por toda a força oferecida a mim, que continuemos juntos seja nos bons ou nos maus momentos, e que possamos passar aque-

les velhos fins de semana juntos com nossos amigos do bom Jacintinho, nos divertindo e aprendendo que humildade é super importante pra se viver bem.

A minha querida *Célia*, por todo carinho e compreensão, e também por sua enorme paciência. A você, meus agradecimentos especiais e todo meu amor.

Ao meus pais, *Manoel* e *Marineide* e minha irmã, *Manoelle*, por todo o amor e todo apóio dado a mim em todas as etapas de minha vida. Sou eternamente grato.

Ao CNPq e Fapeal pelo apóio financeiro dado a mim durante minha graduação. Agradeço a CAPES pelo apóio finaceiro que possibilitou a continuidade de meus estudos.

Em Especial, agradeço a DEUS por esta oportunidade.

Resumo

Sistemas de um elétron com desordem não correlacionadas apresentam autoestados de energia exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem e para dimensões $d \leq 2$. Entretanto, uma série de recentes estudos têm mostrado que a presença de correlações de longo alcance sobre a distribuição de desordem ou acoplamentos de longo-alcance pode estabilizar estados estendidos em sistemas de baixa dimensionalidade. Nesta dissertação nos investigaremos o problema de percolação quântica em sistemas unidimensionais com acoplamentos de longo-alcance cuja probabilidade de ocorrência de uma ligação entre sítios separados por uma distância r decai com $p(r) = 1/r^{1+\sigma}$. Neste trabalho concentraremos nossa atenção no intervalo $0 < \sigma < 1$, visto que para $\sigma > 1$ este modelo se comporta como os modelos de acoplamentos de curto-alcance visto na literatura. Utilizando um formalismo de diagonalização exata, computamos os autoestados de energia, estimamos a largura espacial destes estados e calculamos a densidade de estados (DOS). Analisamos o espalhamento de um pacote de onda inicialmente localizado, apresentando o número de participação dependente do tempo, bem como, a probabilidade de retorno. Nossos resultados mostra a existência de uma fase de estados estendidos. Através da análise da flutuação do número de participação em cadeias de tamanho finito constatamos que existe uma transição de percolação quântica para o expoente de decaimento $\sigma_c = 0,68$, onde abaixo deste valor os estados são verdadeiramente estendidos. Este valor é maior do que os obtidos na literatura para o surgimento de estados estendidos em modelos de Anderson unidimensional com acoplamentos de longo-alcance com decaimento tipo lei de potência. Assim não há uma ligação direta entre as transições de Anderson e de percolação quântica em cadeias com acoplamentos de longo alcance.

Abstract

The one-electron systems with an uncorrelated disorder distribution that do present exponentially localized for any degree of disorder and for dimensions $d \leq 2$. In recent years, several studies showed that the presence of long-range correlations in the disorder distribution or long-range coupling can stabilize delocalized states. In this master degree thesis, we analyze the quantum percolation phenomena in power-law diluted chains for which the probability of occurrence of a bond between sites separated by a distance r decays as $p(r) = 1/r^{1+\sigma}$. Using an exact diagonalization scheme on finite chains, we compute the eigenstates, the participation number and density of states. We analyze the spreading of an initially localized wave-packet, the time dependent participation number as well as the return probability. Our results show the existence of a phase of extended states. By considering the scale invariance of the fluctuations of the participation number at the Anderson transition, we obtained that extended states emerges for $\sigma < 0.68$. This limiting value is larger than the one reported in the literature for the emergence of extended states in one-dimensional Anderson models with power-law decaying couplings. Therefore, the present results indicate that there is not link between the quantum percolation and Anderson transition in chains with long-range coupling

Sumário

Folha de rosto	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iv
Abstract	v
Sumário	vi
1 Introdução às propriedades de transporte eletrônico em sólidos	1
1.1 Introdução	1
1.2 Sistema sem Desordem: Modelo de Bloch	3
1.2.1 Modelo de Bloch	5
1.3 Sistemas Desordenados	7
1.3.1 Modelo de Anderson	9
1.3.2 Teoria de Escala para a Transição de Anderson	11
1.3.3 Medidas do Grau de Localização	17
1.3.4 Correlações no modelo de Anderson	19
2 Percolação Quântica em Cadeias Diluídas com Ligações de Longo-Alcance	24
2.1 Introdução	24
2.2 Percolação Quântica	25

2.2.1	Percolação Quântica com Ligações de longo Alcance em Sistemas Unidimensionais	27
3	Sumário, Conclusões e Perspectivas	38
	Apêndice A	40
	Referências Bibliográficas	46

Capítulo 1

Introdução às propriedades de transporte eletrônico em sólidos

1.1 Introdução

A maioria dos modelos relacionados a sólidos se baseia em sólidos com arranjos estruturais ordenados, simetria translacional. Em geral, as formulações da Mecânica Estatística e da Mecânica Quântica prediz, que quasi-partículas e excitações coletivas, como por exemplo elétrons, fônons e mágnons, em modelos com simetria translacional, sejam descritas através de uma função de onda estendida por todo o sistema.

Entretanto, grande parte dos sólidos reais, seja os naturais ou criados em laboratórios, não possuem uma estrutura cristalina perfeita. Quando um sistema tem sua estrutura cristalina quebrada, dizemos que este sistema é desordenado. Um sistema desordenado pode ser classificado como: sistema de desordem estrutural, quando os átomos do sistema são distribuídos de forma aleatória, sem arranjo espacial; e sistema de desordem composicional, quando impurezas, íons ou sítios vazios ocupam de forma aleatória os pon-

tos de uma rede cristalina. Em geral, a desordem em sólidos reais pode ser causada por impurezas, distorções na rede, deslocamentos na estrutura cristalina, etc. Sistemas desordenados possuem propriedades físicas distintas das previstas para os sistemas cristalinos. Um exemplo disto é o modelo de Bloch que prevê a ausência de resistência elétrica para cristais perfeitos, diferentemente do encontrado para sólidos reais. Por volta de 1958, P. W. Anderson[1] introduziu um modelo que ajudava a entender a influência da desordem nas funções de onda eletrônica. Originalmente, tal modelo considerava apenas os elétrons movendo-se sobre a influência de um potencial aleatório devido a desordem no meio. De forma sucinta, Anderson mostrou que graus de desordem fortes induz a localização das funções de onda eletrônicas, ou seja, as funções de onda fica restrita a uma região finita da rede, tornando o material isolante. No entanto, para graus de desordem fracas as funções de onda eletrônicas se estende pela rede, tendo este um comportamento metálico. Para graus de desordem intermediários, pode haver mudança do estado estendido para o estado localizado, o que chamamos de transição metal-isolante ou transição de Anderson.

O modelo de Anderson prevê que em sistemas com dimensão $d \leq 2$ todos os estados eletrônicos são localizados[2], independente do grau da desordem. Contudo, nas últimas décadas uma série de trabalhos tem sido apresentados, nos quais correlações de curto e longo-alcance na distribuição da desordem[3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] induz transições de Anderson mesmo em sistemas de baixa dimensionalidade. Este comportamento em sistemas de baixa dimensionalidade, vem motivando o estudo de sistemas com desordem correlacionadas em outras áreas de conhecimento, como por exemplo, a conjectura de que correlações de longo-alcance sejam responsáveis pelo transporte eletrônico no DNA.[16]

Atualmente, devido as melhoras na tecnologia de manufaturação de sólidos em escala nanoscópica, é possível fabricar materiais em que uma ou mais dimensões são con-

finadas de tal maneira que os graus de liberdade transversais encontram-se congelados em baixas temperaturas[17]. Isto faz com que sistemas de baixa dimensionalidade deixem de ser problemas de interesse puramente acadêmico para se tornarem sistemas fisicamente realizáveis.

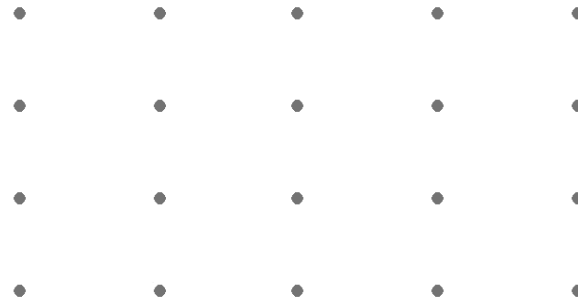
Esta Dissertação tem como objetivo estudar o problema da percolação quântica de um elétron em uma cadeia com desordem correlacionada. Este trabalho está organizado da seguinte forma: no restante deste capítulo, faremos uma revisão teórica sobre as propriedades de transporte eletrônico em sólidos cristalinos e com desordem, com o objetivo de apresentar o contexto científico no qual esta dissertação se insere. No segundo capítulo, estudaremos o problema da percolação quântica com ligações de longo-alcance, buscando entender como as correlações influenciam na dinâmica das funções de onda eletrônica. No terceiro capítulo, apresentaremos nossas conclusões bem como perspectiva para futuros estudos.

1.2 Sistema sem Desordem: Modelo de Bloch

Grande parte dos estudos em física do estado sólido são realizados levando-se em conta as quasi-partículas ou excitações coletivas em cristais. O interesse dos físicos por esta área aumentou consideravelmente após a descoberta da difração por raios X por W.L. Bragg em 1913, tornando possível a comprovação de vários cálculos e previsões teóricas simples sobre propriedades cristalinas, tal como, o parâmetro de rede, ou espaçamento atômico médio.

Um cristal ideal é construído por uma repetição espacial, em escala atômica, de unidades estruturalmente idênticas, células unitárias. Podendo esta unidade ser composta por um ou mais átomos, sendo de um único elemento ou não. A estrutura de todos cristais

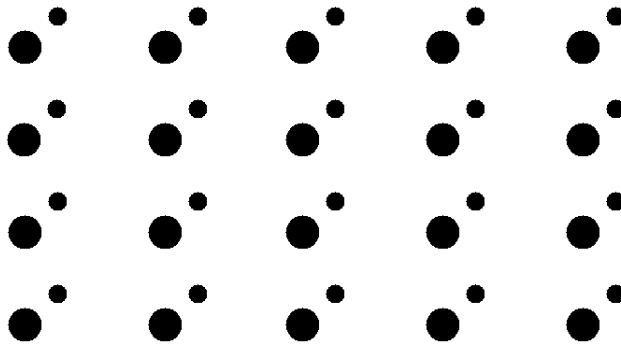
são descritas em termos de uma rede periódica, comumente chamada de rede de Bravais, com um grupo de átomos fixados em cada ponto da rede. A relação lógica para a formação de uma estrutura cristalina pode ser escrita por



(a) Rede



(b) Base, contendo 2 íons



(c) Estrutura cristalina

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

Rede Periódica + Base = Estrutura Cristalina (1.1)

Toda base de um cristal correspondente a cada ponto da rede, são idênticos em composição arranjo e orientação. A figura (1.1) mostra a formação de um cristal adicionando uma base aos pontos de uma rede periódica.

1.2.1 Modelo de Bloch

O problema de elétrons em um sólido é de difícil tratamento teórico, pois em princípio, consiste de um problema de muitos corpos interagentes. O estudo completo deste problema deve levar em conta as interações elétron-elétron e elétron-íon. Contudo, se utilizarmos uma aproximação de elétrons independentes em uma rede cristalina, a interação elétron-íons pode ser representada por um elétron em um potencial iônico efetivo $U(\mathbf{r})$. Considerando que os íons estão dispostos em uma rede periódica, podemos supor que o potencial $U(\mathbf{r})$ também é periódico e com a mesma periodicidade da rede, ou seja:

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

onde \mathbf{R} é um vetor da rede periódica subjacente ao cristal. Um típico potencial cristalino é mostrado na figura (1.2)

Devemos levar em consideração que a ordem dos espaçamentos atômicos, ou seja, a ordem de grandeza de \mathbf{R} , é de 10^{-8} cm, ou seja, da ordem de um típico comprimento de onda de De Broglie. Com isso, devemos utilizar conceitos quânticos na análise deste problema.

Utilizando o potencial introduzido na equação (1.2), a equação de Schrödinger para

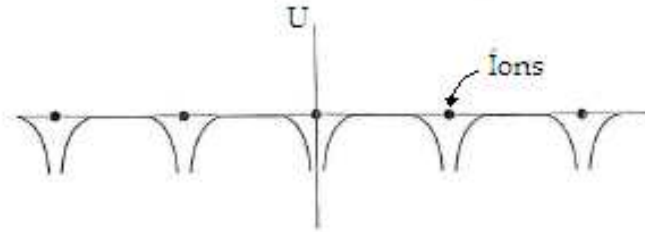


Figura 1.2: Padrão típico de um potencial cristalino unidimensional

um elétron se torna:

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

Quando o potencial $U(\mathbf{r})$ é nulo, temos a equação de Schrödinger para o elétron livre. Os elétrons independentes que obedecem a equação de Schrödinger com potencial periódico é chamado de *elétron de Bloch*.

Uma importante propriedade dos estados estacionários dos elétrons de Bloch, é que as soluções da equação de Schrödinger são dadas na forma de ondas planas com a periodicidade do cristal. Como segue:

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

onde

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

para qualquer \mathbf{R} da rede de Bravais.

Esta propriedade é conhecida como *teorema de Bloch*[22] e as funções $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são chamadas de *funções de Bloch*. Os valores dos vetores de onda \mathbf{k} são determinados pelas condições de contorno imposta ao problema, tendo propriedades semelhantes ao vetor de onda \mathbf{k} do modelo do elétron livre. O teorema de Bloch também pode ser escrito na seguinte forma alternativa:

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

Nos cristais perfeitos, as funções de onda, ou funções de Bloch, se estende por toda a rede, e devido ao caráter periódico, o elétron tem igual probabilidade, não nula, de estar em qualquer posição da rede. Portanto os elétrons podem mover-se livremente pelo sólido, caracterizando uma fase metálica.

Entretanto, como já foi dito anteriormente, a estrutura cristalina de sólidos reais não é perfeita. Assim, temos que levar em consideração a desordem de sua estrutura para se obter resultados mais realistas. Um dos modelos que leva em consideração os efeitos da desordem é o modelo Anderson.

1.3 Sistemas Desordenados

Grande parte dos sólidos naturais, e até os produzidos em laboratório, possuem defeitos que destroem a invariância translacional. A não consideração desses defeitos em alguns modelos teóricos, resulta em previsões errôneas de algumas propriedades físicas.

Em 1958, P.W. Anderson introduziu um modelo em que a dinâmica quântico-mecânica de certas entidades (mágnos ou eletétrons, por exemplo) de sistemas desordenados era descrita, não em termos da temperatura, e sim através de saltos quânticos, *hopping*, entre sítios da rede. Com este modelo Anderson mostrou que, na presença de desordem,

a natureza da função de onda pode mudar de estendida, como as ondas de Bloch, para localizada.

Para entender melhor o papel da desordem, consideremos o modelo de Bloch com potencial periódico nulo ($U(\mathbf{r}) = 0$), ou seja, um elétron livre. Ao introduzirmos uma única barreira de potencial, a função de onda será parcialmente transmitida e parcialmente refletida. Agora, se ao invés de uma única barreira, introduzirmos duas barreiras de potencial. Estas duas barreiras provocará reflexões na função de onda, gerando ondas incidentes e refletidas que poderão sofrer interferências construtivas ou destrutivas a depender da diferença de fase existente. As interferências podem mudar bastante a forma da função de onda. Consideremos agora a existência de um potencial aleatório, o que pode ser representado por barreiras de potencial posicionadas aleatoriamente ou de intensidades aleatórias. Assim a função de onda sofrerá diversas reflexões perdendo sua coerência de fase.

Para pequeno grau de desordem do potencial, a função de onda continua estendida, perdendo apenas sua coerência de fase, sendo este ainda um regime metálico. O comprimento de coerência é seu livre caminho médio(fig. 1.3a). Se o grau de desordem do potencial for forte, as reflexões sofridas pela função de onda causam interferências destrutivas que induzem uma localização exponencial da função de onda, ou seja, a função de onda se concentra em uma pequena região e tem valor desprezível em qualquer outro lugar do sólido. A probabilidade de encontrar um elétron a uma distância r do centro da função de onda é $\psi(r) \propto e^{-r/\lambda}$, ou seja, decai exponencialmente, daí o termo localização exponencial. O parâmetro λ é chamado de comprimento de localização(fig. 1.3b). Este consiste de um regime isolante.

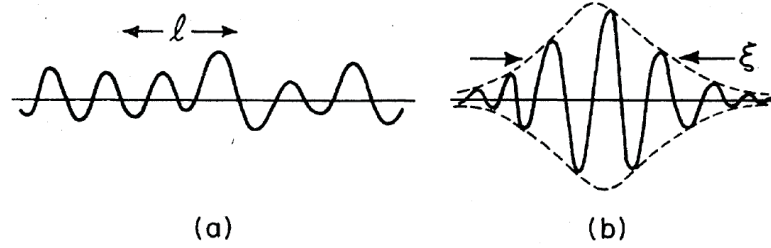


Figura 1.3: (a) Função de onda estendida. O comprimento de coerência é dado por l . (b) Função de onda exponencialmente localizada. O parâmetro λ nos dá o comprimento de localização.

1.3.1 Modelo de Anderson

O modelo de Anderson é o modelo básico para o estudo de propriedades de transporte eletrônico em sistemas desordenados. O seu Hamiltoniano despreza a interação Coulombiana entre os elétrons, e introduz um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos na presença de um potencial aleatório. O hamiltoniano de Anderson, escrito numa representação de Wannier, é dado por:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (1.7)$$

onde ϵ_i é a energia do sítio i e t_{ij} é a integral de transferência entre os sítios i e j , também conhecido como amplitude de *hopping*, e decresce muito rapidamente com a distância entre os sítios $|i - j|$. O estado $|i\rangle$ é o orbital atômico centrado no sítio i . O conjunto de orbitais $|i\rangle$ são ortogonais entre si e constituem uma base na qual podemos expandir os autoestados de H . A desordem neste modelo é introduzida escolhendo aleatoriamente as energias ϵ_i dentro de um intervalo de largura W . O parâmetro W é chamado de largura da desordem e este termo controla a transição metal-isolante. O modelo de Anderson tridimensional apresenta uma transição metal-isolante para um valor crítico $W = W_c$,

tornado-se metálico para $W < W_c$.

Para a obtenção dos autoestados e autovalores eletrônicos do Hamiltoniano H , torna-se necessário resolver a equação de Schrödinger ($H\psi = E\psi$) com um termo aleatório. Para isto, utilizamos uma expansão dos autoestados na base dos orbitais atômicos, $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$, obtendo-se assim, a equação de Schrödinger para o Hamiltoniano de Anderson:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j \quad (1.8)$$

Analizemos a equação (1.8) em alguns casos limites. Consideremos que a rede seja regular e que só existem termos de *hopping* não nulos somente entre os z primeiros vizinhos, sendo estes de mesma magnitude. Logo a Equação (1.8) torna-se:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=1}^{j=z} c_{i+j} \quad (1.9)$$

onde t é o termo de transferência entre qualquer par de sítios vizinhos. O caso cristalino ($W = 0$) pode ser obtido como um caso limite da Equação (1.9). Fazendo as energias ϵ_i constante e iguais a ϵ_0 . Para uma rede linear ($z = 2$) a Equação (1.9) fica:

$$(E - \epsilon_0)c_i = t(c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (1.10)$$

As soluções tipo onda de Bloch pode ser usada como solução da equação anterior. Assim, escolhendo $c_n = c_0 e^{ink}$ e substituindo em (1.10), obtemos:

$$E = \epsilon_0 + 2t \cos(k) \quad (1.11)$$

sendo esta a relação de dispersão obtida para o modelo de Bloch unidimensional. A banda de energias permitidas é dada por:

$$\epsilon_0 - 2t < E < \epsilon_0 + 2t \quad (1.12)$$

tendo uma largura de banda cristalina de $B = 4t$. De forma geral, a largura da banda cristalina para uma rede de dimensão d com número de primeiros vizinhos(ou número de coordenação) z é dada por $B = 2zt$.

O caso mais geral, tomando W e t diferentes de zero, foi estudado por Anderson através de teoria da perturbação, utilizando W e t como termos perturbativos. Ao longo dos anos, este problema tem sido estudado por diversas técnicas matemáticas sofisticadas como métodos de função de Green e técnicas de perturbação diagramática. O modelo de Anderson foi de importância fundamental para compreensão e aprimoramento do conhecimento sobre transições metal-isolante que ocorrem em diversos materiais com desordem, e tem sido uma alavanca para muitos trabalhos relacionados às propriedades de transporte eletrônico.

1.3.2 Teoria de Escala para a Transição de Anderson

Em 1979, Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishman[2], apresentaram um trabalho no qual obtiveram a dependência da transição metal-isolante com a dimensão do sistema. O escopo desta teoria de escala está na hipótese de que uma única quantidade, a condutância generalizada g , é capaz de controlar a transição metal-isolante em $T = 0$. A teoria de escala foi utilizada por Thoules[24] na reformulação do modelo da Anderson. Na abordagem de Thoules as unidades fundamentais deixam de ser os sítios atômicos i , passando a ser caixas de volume L^d que contêm muitos sítios. O sólido é formado de várias caixas acopladas umas às outras. As energias características do modelo de Anderson, W

e t , são mapeadas respectivamente em ΔE , que representa o espaçamento médio entre os níveis dentro de cada caixa de volume L^d , e em δE , que representa o deslocamento causado por mudanças nas condições de contorno. A densidade de estado média $n(E)$ é dada em termos destas quantidades por:

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (1.13)$$

O princípio da incerteza de Heisenberg é usado para relacionar a variação de energia δE e o tempo t_D necessário para um pacote de onda eletrônica difundir até os contornos da caixa de lado L .

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D} \quad (1.14)$$

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

$$t_D = \frac{L^2}{D} \quad (1.15)$$

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

$$\sigma = e^2 D n(E). \quad (1.16)$$

e combinando esta última com as Eqs. (1.14) e (1.15), temos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))} \quad (1.17)$$

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

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

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

Substituindo, as Eqs. (1.13) e (1.17) em (1.18), obtemos a dependência de escala do parâmetro g :

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

Como a equação (1.17) é válida apenas para os estados estendidos no limite macroscópico a equação (1.19) também é válida apenas neste limite. O termo σL^{d-2} é a definição da condutância de um cubo de dimensão d , lado L e condutividade σ . Desta forma, $g(L)$ pode ser vista como a 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 do sistema.

Consideremos um sistema composto por caixas acopladas de volume L_0^d . Sua condutância generalizada g_0 é dada por

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)} \quad (1.20)$$

Dado g_0 em uma escala de comprimento L_0 , a teoria de escala nos permite encontrar g numa escala de comprimento maior $L = bL_0$. Na nova escala, a condutância generalizada

g é completamente determinada por uma função de escala $f(g_0, b)$ que é função de g_0 e do parâmetro de escala b . Se o fator de escala for tratado como uma transformação contínua ($b = 1 + \epsilon$, onde $\epsilon \ll 1$), o comportamento de escala de g pode ser determinado a partir da função

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.21)$$

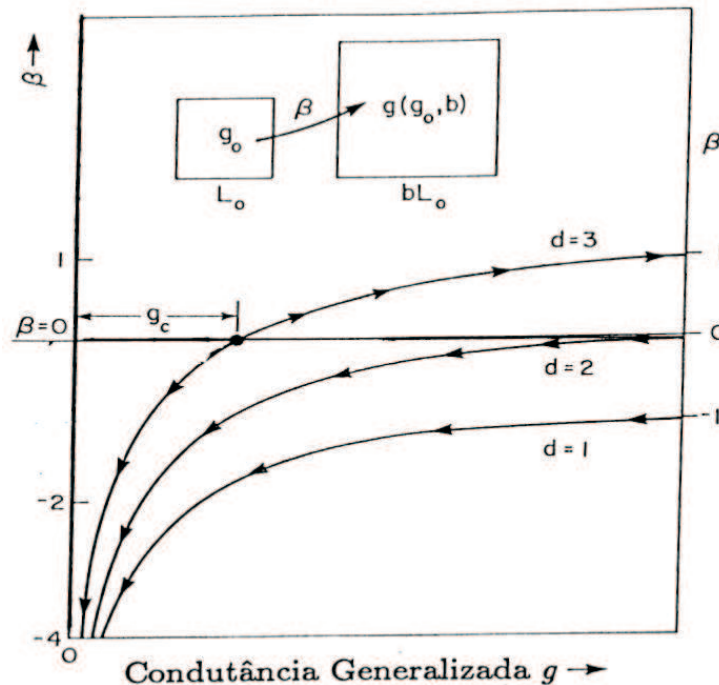


Figura 1.4: Comportamento qualitativo de $\beta(g)$, proposto por Abrahams *et al*[2], para dimensões $d = 1, 2$ e 3 . As setas do diagrama de fluxo sobre as curvas representam a direção em que g varia quando L cresce.

A figura (1.4), proposta por Abrahams *et al*[2], mostra o comportamento de $\beta(g)$ definida na equação (1.21). Para $\beta > 0$, a condutância generalizada g cresce com o crescimento L , caracterizando um comportamento metálico; Para $\beta < 0$, g decresce com o

crescimento de L , indicando um estado isolante. O comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ pode ser determinado tomando os seus limites assintóticos ($g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$). No limite de $g \rightarrow \infty$, podemos usar a equação (1.19) e mostrar que

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.22)$$

Assim temos:

$$\beta(\infty) = \begin{cases} +1 & \text{para } d = 3 \\ 0 & \text{para } d = 2 \\ -1 & \text{para } d = 1 \end{cases} \quad (1.23)$$

Para g pequeno, ou seja, $g \ll 1$, o modelo de Anderson prevê que os estados eletrônicos são exponencialmente localizados. 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 da ordem de $e^{-\gamma L}$, 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 g também pode ser escrita por $g(L) \propto e^{-\gamma L}$. Portanto, da Equação (1.21), temos:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g \quad (1.24)$$

ou seja, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende a zero, independente da dimensão. Ao assumirmos que $\beta(g)$ tenha variação lenta e monotônica entre os limites $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$, certificamos que nossa análise reproduz o comportamento qualitativo da figura (1.4). Para $d = 1$ e $d = 2$ o diagrama de fluxo nos mostra que g sempre diminui com o crescimento de L . Em $d = 3$, o diagrama de fluxo mostra a existência de um ponto fixo instável em $\beta = 0$

e $g = g_c$. O valor g_c separa a região de forte acoplamento e baixa desordem ($g < g_c$), onde temos estados estendidos, da região de fraco acoplamento e forte desordem ($g > g_c$), onde temos estados localizados. Este diagrama mostra claramente a dependência da transição de Anderson com a dimensão: em $d = 1$ e $d = 2$ não existe transição metal-isolante, diferentemente do caso $d = 3$. O comportamento crítico perto da transição em $d = 3$ também foi estudado por teoria de escala, por exemplo, B. Kramer em 1993[25]. Estudos mostram que o comprimento de localização (λ) e a condutividade σ , próximos da energia crítica de transição (*mobility edge*) apresentam comportamento tipo lei de potência:

$$\begin{aligned}\lambda &\propto (E - E_c - c)^{-\nu} \\ \sigma &\propto (E - E_c - c)^s\end{aligned}\tag{1.25}$$

Através de técnicas diagramáticas (Vollhard e Wölfle[25]) e expansão em $d+\epsilon$ (Wegner[26]) foi estimado que $s = \nu = 1$. Porém, recentemente, considerações de variáveis irrelevantes e correções não lineares na teoria de escala, fez com que se obtesse o expoente crítico com uma maior precisão numérica $\nu \approx 1.57$ [27, 28, 29, 30].

Transições metal-isolante vem sendo observadas em vários experimentos. Um exemplo destes são os experimentos realizados em silício dopados com fósforo ou bário[17, 25, 31, 32, 33]. Nestes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. A largura de desordem apresentada no modelo de Anderson é devido à concentração de dopantes (N_p) ou presença de um campo. A energia crítica do sistema (E_c) é a concentração crítica dos dopantes (N_p^c) ou o valor do campo (H_c) para os quais a transição acontece. A classificação dos materiais foi escolhida da seguinte forma: aqueles que apresentavam $\nu = 0.5$ eram os semi-condutores não-compensados; aqueles que apresentavam $\nu = 1$ eram os semi-condutores compensados ou materiais amorfos. Recentemente, foram encontrados um expoente $\nu = 1$ para o silício dopado com fósforo não compensado (Si :

P)[33] e um expoente $\nu = 1.6$ para o silício dopado com Bário (Si : B)[17], violando assim a classificação anteriormente proposta. Em geral, a diferença no expoente vem sendo atribuída à presença de outros efeitos no experimento, como por exemplo, a interação Coulombiana entre os elétrons [33].

1.3.3 Medidas do Grau de Localização

Para que possamos caracterizar as transições metal-isolante quantitativamente, precisamos definir alguns parâmetros com os quais possamos descrever o caráter estendido ou localizado de um certo estado. Um dos parâmetros comumente utilizados para esta descrição é o comprimento de localização λ que é definido a partir do comportamento assintótico da função de onda. Como já foi dito anteriormente, para grandes distâncias r do centro de localização, a função de onda apresenta um decaimento do tipo exponencial

$$\psi(r) = f(r)e^{-r/\lambda} \quad (1.26)$$

Para estados estendidos $\lambda \rightarrow \infty$. O comprimento de localização λ pode ser calculado através de várias técnicas, entre as quais, podemos citar o grupo de renormalização e matriz de transferência.

Um outro parâmetro importante é o número de participação ξ que é obtida a partir da diagonalização numérica do Hamiltoniano H escrito na base dos orbitais atômicos ($|\psi\rangle = \sum_j |j\rangle$). Assim, ξ é definida por:

$$\xi = \frac{\sum_j |c_j|^2}{\sum_j |c_j|^4} \quad (1.27)$$

Analizaremos, agora, o caso de uma cadeia pura de N sítios onde todos os autoestados são

estendidos com c_j constante. Esta análise nos ajudará a compreender como o número de participação está relacionada com a natureza estendida-localizada dos estados eletrônicos. Lembrando que os autoestados do hamiltoniano são normalizados, ou seja, $\sum_j |c_j|^2 = 1$, temos que $|c_j| = \frac{1}{\sqrt{N}}$. logo, o número de participação se torna:

$$\xi = \frac{1}{\sum_j |c_j|^4} = \frac{1}{\sum_j \frac{1}{N^2}} = N \quad (1.28)$$

Assim, ξ é a grandeza que define em quantos sítios da rede as amplitudes de probabilidade c_j são diferentes de zero. No limite termodinâmico, a participação diverge para os estados estendidos e se mantém finito para os estados localizados.

Também, é usual a utilização da densidade de estados (DOS) para a caracterização dos auto-estados de sistemas desordenados[18]. A densidade local de estados é definida por:

$$DOS_i(E) = \sum_{n=1}^N |\psi_n(r_i)|^2 \delta(E - E_n) \quad (1.29)$$

que é a soma das amplitudes de todos os auto-estados na posição r_i , sendo N o número de sítios. A densidade de estados basicamente representa o número de estados dentro de um intervalo de energia $E + \delta E$. Também podemos definir a densidade média de estados como

$$DOS(E) = \frac{1}{MN} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N DOS_i(E) \quad (1.30)$$

onde M é o número de amostras. Quando os estados são estendidos, o espaçamento entre os níveis sofrem pequenas flutuações devido a repulsão existentes entre eles. Com isso pequenas flutuações surgem na densidade de estado quando os estados são estendidos. Por outro lado, os níveis de energia apresentam uma pequena superposição quando os estados são localizados. Estes estados não interagem efetivamente e, portanto, não há

correlações entre eles. Por isso a densidade de estado flutua muito quando os estados são localizados[19, 20, 21].

Outra forma de conhecermos a natureza dos estados eletrônicos é, estudando a dinâmica do sistema. Consideremos um elétron inicialmente ($t = 0$) localizado no sítio m . Assim, as condições iniciais são: $|c_m(t = 0)|^2 = 1$ e $|c_i(t = 0)|^2 = 0$, para $i \neq m$. Podemos escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo, utilizando-se de $|\psi\rangle = c_i|i\rangle$, por:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{dc_i}{dt} = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j \quad (1.31)$$

Se no limite termodinâmico, a probabilidade de encontrar o elétron no sítio inicial for zero, ou seja, $|c_m(t \rightarrow \infty)| = 0$, o elétron é itinerante, caracterizando o estado estendido. Caso contrário, se $|c_m(t \rightarrow \infty)| \neq 0$, a função de onda se concentra apenas na vizinhança do sítio m , caracterizando o estado localizado. A quantidade $|c_m(t)|$ é conhecida por *probabilidade de retorno* ao sítio inicial e normalmente é obtida através de integração numérica do conjunto de equações de movimento do sistema, utilizando-se do método de Runge-Kutta[23].

1.3.4 Correlações no modelo de Anderson

A teoria de escala para o modelo de Anderson mostra a existência de estados localizados em sistemas de dimensão $d \leq 2$ para qualquer quantidade de desordem e a possibilidade de uma transição metal-isolante para um sistema 3d. Entretanto, uma série de trabalhos recentes indicam que sistemas de baixa dimensionalidade pode demonstrar transições metal-isolante, contrariando as previsões do modelo de Anderson original. Tais comportamentos inesperados surgem através de correlações na distribuição da desordem e/ou fazendo com que a distribuição de desordem obedeça uma sequência pseudo-aleatória.

Em 1976, Theodorou e Cohen[34] mostraram que um modelo de *tight-binding* unidimensional com amplitudes de hopping aleatórias apresentava estados estendidos no centro da banda de energia. Contudo, Fleishman e Licciardello[35] mostraram que a função de onda tem um comportamento assintótico do tipo $\psi(r) \propto e^{-\lambda\sqrt{r}}$. Assim, o coeficiente de transmissão, que está relacionado com a condutividade σ , vai a zero no limite termodinâmico[36], fazendo deste um estado localizado, apesar do comprimento de localização ser divergente. Em 1989, D. H. Dunlap *et al*[5], mostraram que em um modelo com correlações tanto nos potenciais dos sítios quanto nos termos de hopping, pode haver uma delocalização de estados inicialmente localizados, para qualquer dimensão do sistema.

Nas décadas de 70 e 80 vários trabalhos envolvendo modelos de *tight-binding* unidimensionais com potenciais incomensuráveis revelaram a presença de transição metal-isolante[8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]. Tais potenciais tem como característica apresentar um comportamento intermediário entre o caso periódico e o aleatório. Um exemplo é o potencial descrito por:

$$\epsilon_n = V \cos k|n|^\nu \quad (1.32)$$

onde $k = 2\pi\alpha$ e α é um número irracional entre 0 e 1, tornado o potencial incomensurável. Caso α seja um racional e o parâmetro ν assumo o valor $\nu = 1$, ϵ_n tomará forma de um potencial cristalino. Um exemplo de ϵ_n é mostrada na figura (1.5). S. Das Sarma *et al* [13], assim como Griniasty *et al* [12] e Thouless [14], investigaram a localização de um modelo *tight-binding* unidimensional, tendo o potencial regido pela Eq.(1.32). Os resultados são os seguintes:

- Para $0 < \nu < 1$ e $V < 2$:

Estados estendidos na faixa $-2 + V < E < 2 - V$:

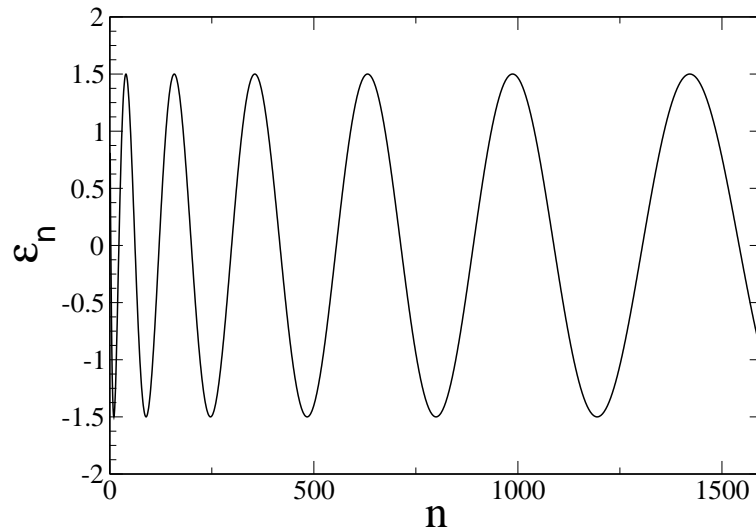


Figura 1.5: Potencial aperiódico dado pela Eq.(1.32). Os parâmetros característicos do potencial são: $V = 1.5, \pi\alpha = 1$ e $\nu = 0.5$

Estados localizados nas faixas $2 - V < E < 2 + V$ e $-2 - V < E < -2 + V$

- Para $0 < \nu < 1$ e $V > 2$:

Todos os estados são localizados

- Para $\nu = 1$ e $V < 2$

Todos os estados são estendidos

- Para $\nu = 1$ e $V > 2$

Todos os estados são localizados

- para $1 < \nu < 2$:

Todos os estados são localizados, mas o coeficiente de Lyapunov se aproxima de zero no centro da banda

- Quando $\nu > 2$:

O sistema se comporta como um modelo de Anderson unidimensional e todos os estados são exponencialmente localizados.

Em 1899, Flores[4] mostrou que o Hamiltoniano de Anderson Unidimensional, tendo as energias dos sítios e as amplitudes de hopping aleatórios, pode apresentar uma energia crítica E_c , onde os estados permanecem estendidos caso sejam introduzidas correlações entre as energias dos sítios e os termos de hopping. Em 1990, Dunlap *et al*[5] estudaram uma cadeia composta por uma liga binária, através de um Hamiltoniano de Anderson. Nesta liga as energias dos sítios podem assumir valores de ϵ_a e ϵ_b com probabilidades p e $1 - p$, respectivamente, além dos sítios de energia ϵ_a aparecerem sempre em pares. O termo de hopping entre os primeiros vizinhos é constante e igual a t . Foi mostrado 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 evolue de forma superdifusiva. Porém se $|\epsilon_a - \epsilon_b| = 2t$ a evolução do pacote de onda é difusiva. Nos outros regimes a função de onda é localizada.

Modelos de Anderson unidimensionais com desordem correlacionada vem sendo amplamente estudado, visto que estes apresentam estados eletrônicos estendidos[4, 5], que é uma propriedade não usual de sistemas desta dimensão. Nesses modelos de baixa dimensionalidades, a presença de desordem de curto-alcance induz energias ressonantes onde, os estados eletrônicos são estendidos, formando um grupo de medida nula[37]. Porém, se a correlação é de longo-alcance é possível ocorrer uma transição metal-isolante em uma dimensão[6, 38]. Efeitos relacionados com a presença de correlações de longo-alcance em sistemas desordenados tem sido recentemente analisados. Em 1998, Russ *et al*[39], apresentou um modelo de Anderson unidimensional onde as energias dos sítios apresentam uma função de correlação dada por $C(l) \propto \langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \propto l^{-\gamma}$, sendo γ uma constante. Foi mostrado que para γ positivo todos os estados são localizados. Contudo o comprimento de locali-

zação diverge quando γ tende a zero. Moura e Lyra[6], em 1998, estudaram o modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo-alcance na diagonal do Hamiltoniano. Neste modelo, as correlações de longo-alcance são introduzidas escolhendo as energias por sítio como sendo um movimento Browniano fracionário, cuja densidade espectral é dada por $S(k) = 1/k^\alpha$. Esta sequência é definida por:

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi ik}{N} + \phi_k\right) \quad (1.33)$$

onde N é o número de sítios, ϕ_k são $N/2$ fases independentes e aleatórias distribuídas uniformemente no intervalo de $[0, 2\pi]$, α é o parâmetro que controla o grau de correlação da sequência e a constante $\mathcal{C}(\alpha)$ é escolhida de forma que $\Delta\epsilon_n = 1$. Utilizando um formalismo de grupo de renormalização eles mostraram que, para $\alpha > 2$, este sistema pode exibir uma fase de estados estendidos no centro da banda. Pela primeira vez uma verdadeira transição metal-isolante em sistemas unidimensional foi apresentada. Vários outros trabalhos que incluem correlações de longo-alcance em sistemas de baixa dimensionalidade tem sido recentemente propostos[16, 40, 41, 42, 43, 44, 45]. Por exemplo, o estudo de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados[40] e a conjectura de que as correlações de longo-alcance são responsáveis pelo transporte eletrônico no DNA[16, 43, 44].

Capítulo 2

Percolação Quântica em Cadeias Diluídas com Ligações de Longo-Alcance

2.1 Introdução

A percolação clássica é um problema puramente geométrico, cujo comportamento crítico conciste na existência de conectividade entre sítios de uma rede diluída. A diluição da rede pode ser nos sítios ou nos acoplamentos. O parâmetro de ordem da percolação é a probabilidade p de um sítio ou uma ligação entre sítios está presente na rede. Quando um grupo de sítios estão conectados entre si, diz-se que estes formam um *cluster*. Quando um *cluster* liga um extremo ao outro da rede diz-se que ocorreu uma percolação no sistema. O valor extremo da probabilidade p , a qual se ocorre uma percolação, designa-se de limite de percolação e depende da geometria e da dimensão da rede. Este simples modelo explica uma série de fenômenos físicos como fluxo de fluidos em meios porosos, resistores aleatórios,

magnetos diluídos, entre outros.

Embora, percolação clássica seja extremamente usual para explicar uma série de fenômenos, esta teoria falha quando aspectos quânticos começam a surgir. Em fenômenos tais como a supercondutividade e o transporte eletrônico em sólidos amorfos, a utilização do conceito de percolação quântica torna-se necessário.

Em sistemas unidimensionais onde as ligações são de curto-alcance, qualquer diluição nos sítios ou nas ligações inpedem a formação de um *cluster* percolante. Por outro lado, em cadeias onde as ligações são de longo-alcance, uma transição de percolação pode ocorrer para um valor finito da probabilidade p . Estes modelos tem sido amplamente explorados na literatura, sendo a classe de universalidade da percolação clássica alvo debates[46, 47, 48].

No restante deste capítulo, estudaremos o problema da percolação quântica para uma cadeia diluída onde a probabilidade de ligação entre sítios separados por uma distância r , decai segundo $p = 1/r^{1+\sigma}$. Através da diagonalização exata do hamiltoniano, investigaremos a natureza dos auto-estados eletrônico computando a participação dependente do tempo, bem como, a probabilidade de retorno de um pacote de onda inicialmente localizado.

2.2 Percolação Quântica

Estruturas desordenadas têm atraído o interesse da comunidade científica nas últimas décadas e, além do modelo de Anderson[1], o problema da percolação quântica tem sido amplamente discutido[49, 50]. O modelo de percolação quântica pode ser usado para analisar as propriedades de transporte em semicondutores dopados[51], transição metal-insolante em heteroestruturas bidimensionais de GaAs[52], transições de Hall quânticas[53,

54], entre outros. O problema percolação quântica leva em conta a transmissão de partículas quânticas através de uma rede desordenada percolante.

Podemos formular o problema da percolação quântica através do Hamiltoniano *tight-binding* de um elétron, com desordem binária nos sítios ou nas ligações, do tipo:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n,m,n \neq m} V_{n,m} |n\rangle\langle m| \quad (2.1)$$

onde $V_{n,m}$ representa o termo de *hopping* entre os sítios n e m , ϵ_n a energia no sítio n e $|n\rangle$ o estado de Wannier. Podemos definir dois tipos de percolação, percolação por sítio e percolação por ligação. No caso de percolação por sítio o termo de *hopping* $V_{n,m}$ é tido como constante V e a energia no sítio, ϵ_n , segue a seguinte distribuição:

$$\mathcal{P}(\epsilon_n) = p\delta(\epsilon_n - \epsilon_A) + (1 - p)\delta(\epsilon_n - \epsilon_B) \quad (2.2)$$

onde

$$\epsilon_B = -\epsilon_A. \quad (2.3)$$

Neste caso, $\delta = |\epsilon_A - \epsilon_B|/zV = 2\epsilon_A/zv$ representa o grau da desordem, sendo z o número de primeiros vizinhos. Aqui, a probabilidade p representa a densidade de átomos do tipo A, ou seja, a probabilidade de um dado sítio ser ocupado por um átomo do tipo A.

Para percolação por ligação, a energia dos sítios permanecem constantes, enquanto que o termo de *hopping* $V_{n,m}$ é dado por:

$$\mathcal{P}(V_{n,m}) = p\delta(V_{n,m} - V_A) + (1 - p)\delta(V_{n,m} - V_B) \quad (2.4)$$

onde $V_B = 0$. No caso de percolação por ligação p representa a densidade de ligações, ou seja, a probabilidade de ocorrência de ligação entre dois sítios.

2.2.1 Percolação Quântica com Ligações de longo Alcance em Sistemas Unidimensionais

Vários trabalhos sobre as propriedades dos auto-estados eletrônicos de sistemas diluídos tem sido apresentados nas últimas décadas. Técnicas como funções de Green, teoria de grupo de renormalização, matriz de transferência e diagonalização exata são utilizadas com a finalidade de calcular as diversas quantidades que caracterizam o problema, tais como o comprimento de localização da função de onda, coeficientes de transmissão e reflexão, condutância, entre outros[50, 55, 56, 57, 58, 59, 60]. Um dos pontos ainda em aberto sobre percolação quântica é a definição sobre qual classe de universalidade esta transição pertence. Os resultados obtidos para os expoentes críticos da transição de percolação quântica diferem, em geral, dos expoentes obtidos através do modelo de Anderson com desordem no potencial[55, 56, 57, 58]. Contudo, alguns resultados de análise do estatística de espaçamento de níveis indicam que a transição de percolação quântica pode pertencer a mesma classe de universalidade da transição de Anderson[59].

O modelo de Anderson para sistemas unidimensionais cujas amplitudes de *hopping* decaem com a distância segundo uma lei de potência do tipo $1/r^\alpha$ apresenta uma transição metal-isolante, que é função do expoente da lei de decaimento. Este modelo, conhecido por PRBM (power-law random band matrix), apresenta uma transição metal-isolante em $\alpha = 1$, Sendo todos os estados localizados para $\alpha > 1$ e estendidos para $\alpha < 1$ [61, 62]. Quantidades como o inverso do número de participação, estatísticas de espaçamento de níveis, espectro multi-fractal da função de onda e evolução temporal do pacote de onda tem sido calculadas no ponto crítico, através de métodos analíticos e numéricos[61, 62, 63, 64].

No restante deste capítulo consideraremos um Hamiltoniano *tight-binding* que representa um único elétron em uma rede unidimensional com condições de contorno aberto dado por

$$H = \sum_{n=1}^N \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq m}^N h(|n-m|) |n\rangle\langle m|. \quad (2.5)$$

Neste modelo o potencial nos sítios ϵ_n são independentes assim, podemos fazer $\epsilon_n = 0$ sem perda de generalidade. A presença ou não de uma ligação entre os sítios m e n é controlada pelo termo de *hopping* $h(r = |n-m|)$ que pode assumir os valores $h(r) = 0$ ou $h(r) = 1$ de acordo com a seguinte distribuição

$$\mathcal{P}[h(r)] = p(r)\delta[h(r) - 1] + [1 - p(r)]\delta[h(r)] \quad (2.6)$$

sendo a probabilidade $p(r)$ dada através da seguinte lei de potência

$$p(r = |n-m|) = \frac{d}{r^{1+\alpha}}. \quad (2.7)$$

Neste trabalho utilizaremos apenas $d = 1$, fazendo com que toda cadeia se conecte através de ligações com os primeiros vizinhos, permitindo assim, a possibilidade de percolação clássica. O modelo apresentado nesta seção apresenta um comportamento semelhante aos modelos com ligações de curto-alcance discutidos anteriormente, quando $\alpha > 1$. No restante desta dissertação concentraremos nossas atenções ao intervalo $0 < \alpha < 1$, buscando caracterizar a natureza dos auto-estados eletrônicos e realizar uma comparação direta entre o comportamento crítico da transição de percolação quântica com o da transição de Anderson.

Através da diagonalização direta do hamiltoniano descrito na equação (2.5) para

cadeias de tamanho finito, podemos computar todos os auto-estados e auto-energias para cada realização de desordem e através, destes calcular as diversas quantidades relevantes para a caracterização do problema. Um destas quantidades é o número de participação, definida como sendo o inverso do segundo momento da densidade de probabilidade e dada por:

$$P^{j,\nu} = \frac{1}{\sum_{n=1}^N |f_n^{j,\nu}|^4} \quad (2.8)$$

onde $f_n^{j,\nu}$ é a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron no sítio n do j -th auto-estado e da ν -th realização de desordem. Como já visto na seção (1.3.3), o número de participação escala linearmente com o tamanho da cadeia, divergindo no limite termodinâmico quando os estados são estendidos, e é invariante ao tamanho da cadeia quando os estados são localizados. Podemos também definir a razão de participação média sobre todos os auto-estados das distintas realizações de desordem por:

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{MN} \sum_{\nu=1}^M \sum_{j=1}^N P^{j,\nu} \quad (2.9)$$

onde M é o número de realizações de desordem e a flutuação relativa da participação, que é dada por:

$$\eta = \frac{\Delta \xi}{\langle \xi \rangle} = \frac{\sqrt{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2}}{\langle \xi \rangle} \quad (2.10)$$

Na figura (2.1), apresentamos o comportamento da média sobre todas as realizações de desordem do número de participação, definido na equação (2.8), em função da energia dos auto-estados. Os dados foram obtidos diagonalizando o Hamiltoniano dado pela equação (2.5) em cadeias de 200,400 e 800 sítios e para dois valores do parâmetro

σ que controla o alcance das ligações. Na figura (2.1(a)) mostramos o número de participação médio $\langle p^j \rangle$ versus a energia E para $\sigma = 0.5$. Nesta figura podemos verificar que o número de participação escala com o tamanho da cadeia indicando a presença de estados estendidos. Para $\sigma = 1.0$, o número de participação não escala com o tamanho da cadeia, convergindo para um valor finito no limite termodinâmico, sugerindo que todos os auto-estados sejam localizados.

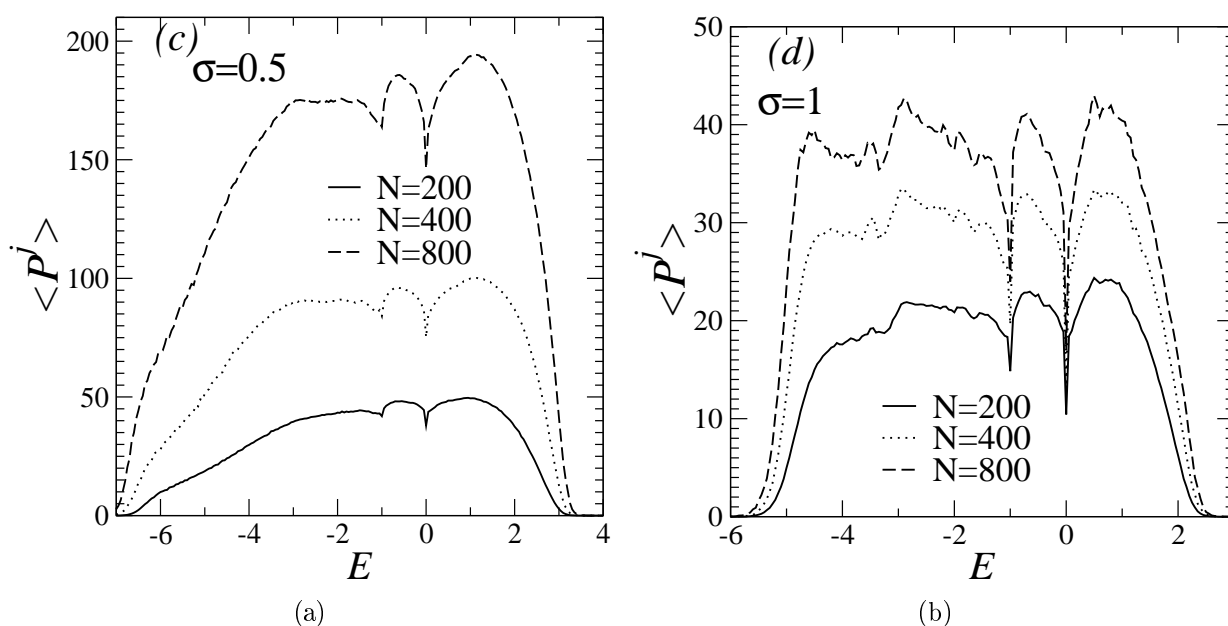


Figura 2.1: Número de participação $\langle p^j \rangle$ (média sobre todas as configurações de desordem) em função da energia para vários tamanhos de cadeia ($N=200, 400$ e 800). Em 2.1(a), $\sigma = 0.5$, o número de participação é proporcional ao tamanho da rede N indicando a presença de estados estendidos. Em 2.1(b), $\sigma = 1.0$, o número de participação converge para um valor finito indicando que todos os auto-estados são localizados.

Outra quantidade relevante na caracterização do problema é a densidade de estados (DOS) definida na seção (1.3.3). Na figura (2.2), nos mostramos a densidade de estados, DOS, versus energia para uma cadeia de 200 sítios e dois diferentes valores de σ . Estes resultados foram obtidos fazendo uma média sobre mais 30000 realizações

de desordem. A densidade de estados apresenta uma certa suavidade para $\sigma = 0.5$ (fig. 2.2(a)), indicado que os estados são estendidos neste regime. Para $\sigma = 1.0$ (fig. 2.2(b)), a densidade de estados apresenta mais flutuações sugerindo que todos os auto-estados sejam localizados. Outra característica, está no fato da densidade de estados ser tipicamente mais larga quando os estados são estendidos devido o maior alcance dos acoplamentos. Este resultado está de acordo com o obtido pela participação.

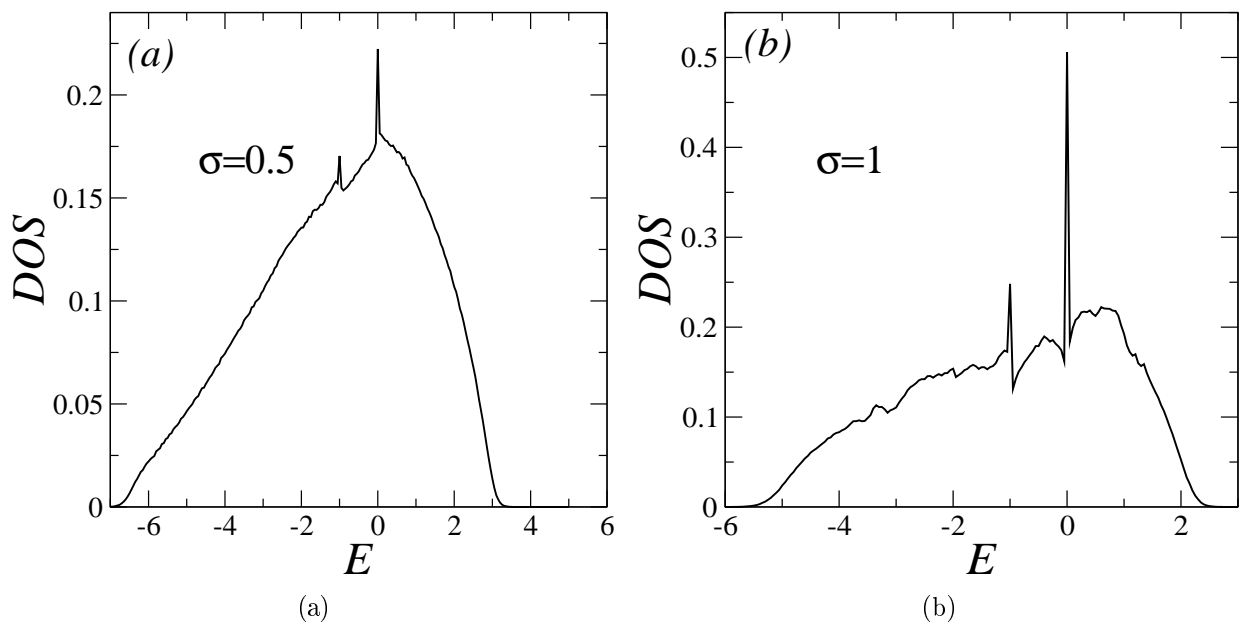


Figura 2.2: Densidade de estados DOS em função da energia para uma cadeia de 200 sítios. Em 2.2(a), $\sigma = 0.5$, a densidade de estados é suave sugerindo a presença de estados estendidos. Em 2.2(b), $\sigma = 1.0$, a densidade de estados flutua muito indicando a natureza localizada dos auto-estados.

É importante notar, tanto na participação, quanto na densidade de estados, a presença de singularidades nas energias $E = -1$ e $E = 0$. A presença destas singularidades está associada com a existência de modos ressonantes fortemente localizados que se encontram em pares de sítios que se conectam com os mesmos conjuntos de sítios da cadeia[58].

Dinâmica do Pacote de Onda

Em geral, a evolução do pacote de onda é obtido através da resolução da equação de Schrödinger dependente do tempo. Para isto, expandimos a função de onda na representação de Wannier

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_n f_n(t)|n\rangle. \quad (2.11)$$

e obtemos a equação de Schrödinger dependente do tempo para cada componente da função de onda $f_n(t)$, utilizando-se do Hamiltoniano dado na equação (2.5) e fazendo $\hbar = 1$:

$$i \frac{df_n(t)}{dt} = \sum_{n \neq m}^N h(|n - m|) f_m(t). \quad (2.12)$$

A equação (2.12) na forma matricial é dada por:

$$i \frac{d\mathbf{f}(t)}{dt} = \mathbf{H}\mathbf{f}(t) \quad (2.13)$$

onde o vetor $\mathbf{f}(t)$ é formado pelas componentes $f_n(t)$ da função de onda nos sítios. A solução da equação (2.13) pode ser dada por:

$$\mathbf{f}(t) = \exp(-i\mathbf{H}t)\mathbf{f}(0). \quad (2.14)$$

Sendo H independente do tempo, podemos escrever a solução dada pela equação (2.14), na seguinte forma:

$$\mathbf{f}(t) = \mathbf{U}^\dagger \exp(-i\mathbf{D}t)\mathbf{U} \quad (2.15)$$

onde \mathbf{D} é o Hamiltoniano (eq. 2.5) em sua forma diagonal e \mathbf{U} é uma matriz unitária. Assim, podemos escrever a função de onda que é solução deste problema por:

$$|\Phi(t)\rangle = \mathbf{U}^\dagger \exp(-i\mathbf{D}t) \mathbf{U} |\Phi(t=0)\rangle \quad (2.16)$$

Este formalismo numérico foi proposto por H.N. Nazareno *et al*[65]. Aqui consideraremos o elétron inicialmente localizado em único sítio, ou seja, $|\Phi(t=0)\rangle = |n_0\rangle$.

Tendo em mãos as autofunções dependente do tempo do sistema podemos calcular as grandezas que nos auxilia na caracterização da natureza dinâmica destes estados. Uma destas grandezas é o já conhecido número de participação, cuja dependência temporal é dada por:

$$\xi(t) = \left\langle \frac{1}{\sum_{n=1}^N |f_n(t)|^4} \right\rangle \quad (2.17)$$

aqui, a média é feita sobre todas as realizações de desordem. Como já vimos anteriormente, o número de participação indica o número de sítios por onde se espalha o pacote de onda.

Na figura 2.3, apresentamos o número de participação escalado com o tamanho da cadeia, ξ/N , versus o tempo t , para vários tamanhos de cadeia e dois diferentes valores do parâmetro σ . Para $\sigma = 0.5$ (fig. 2.3(a)), o número de participação assintótico é proporcional ao tamanho da cadeia N , indicando a presença de estados estendidos. Para $\sigma = 1.0$ (fig. 2.3(b)), o número de participação escalado tende para zero no limite de $N \rightarrow \infty$. Isto surge que todos os autoestados são exponencialmente localizados. Devido aos acoplamentos de longo alcance o pacote de onda se espalha de forma exponencial alcançado o regime assintótico logo após um curtíssimo tempo de evolução.

A análise dos resultados anteriores nos sugere a existência de uma transição de percolação quântica para um valor crítico σ_c do expoente de decaimento, este valor deve estar no intervalo $0.5 < \sigma_c < 1.0$.

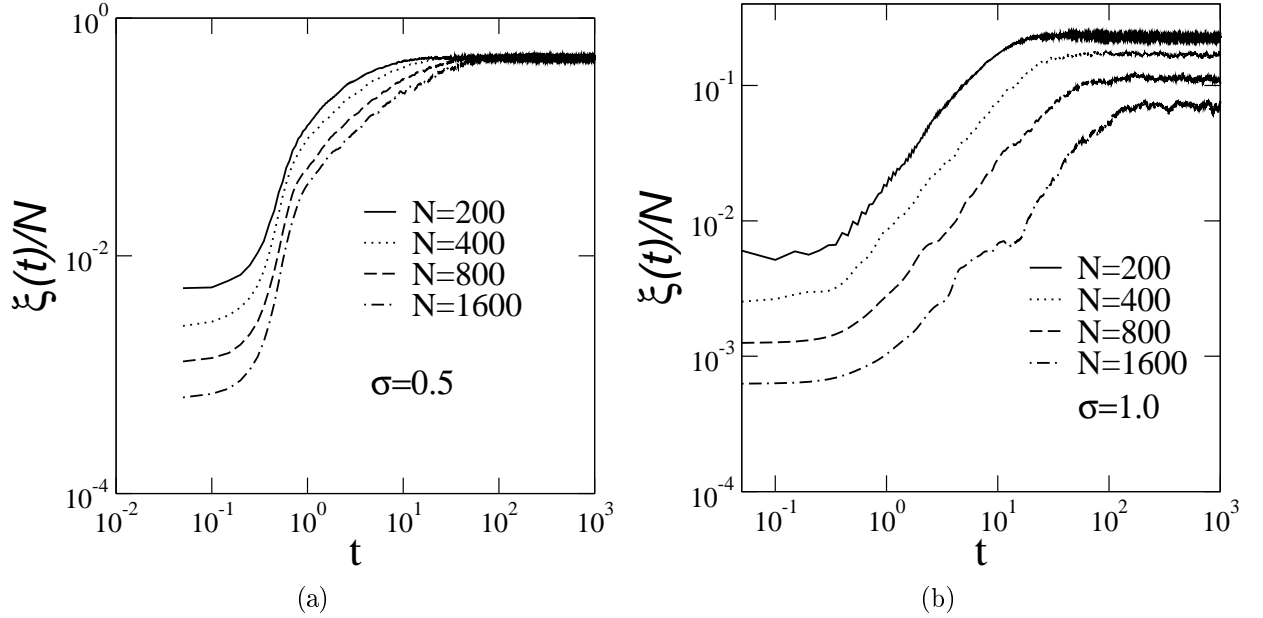


Figura 2.3: Número de participação escalada com o tamanho da cadeia, ξ/N , versus o tempo t para vários tamanhos de cadeia ($N=200,400,800$ e 1600). Em 2.3(a), $\sigma = 0.5$, o número de participação assintótico é proporcional ao tamanho da rede N indicando a presença de estados estendidos. Em 2.1(b), $\sigma = 1.0$, o número de participação tende a zero no limite termodinâmico indicando que todos os auto-estados são localizados.

Com o intuito de descobrir o valor crítico do expoente, no qual acontece a transição de percolação quântica, investigaremos sobre todo o intervalo possível do parâmetro de controle da transição, $0.0 < \sigma < 1.0$, algumas quantidades relevantes. A primeira será a probabilidade de retorno R (probabilidade de retorno vezes o tamanho da cadeia), definida por:

$$R = \frac{N}{t_\infty} \int_0^{t_\infty} |f_{n_0}(t)|^2 dt \quad (2.18)$$

como visto na seção (1.3.3), a probabilidade de retorno nos mostra a probabilidade de encontrar o elétron no sítio onde ele estava inicialmente localizado depois de um tempo t . Em geral, R toma um valor constante finito quando os estados são estendidos e escala

com o tamanho da cadeia quando os estados são localizados.

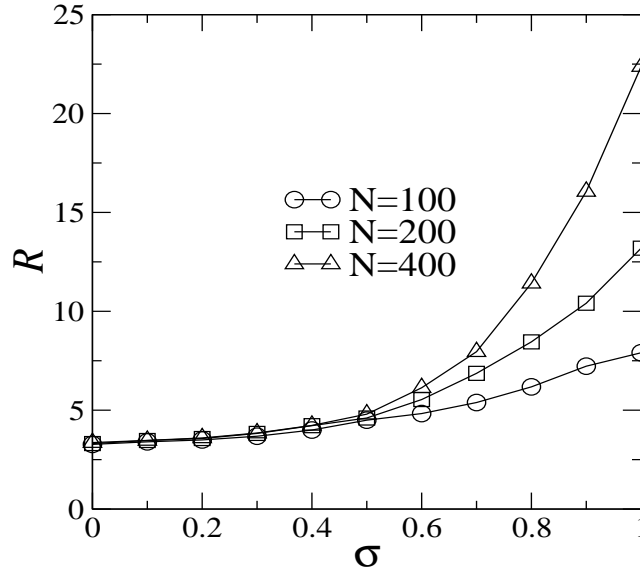


Figura 2.4: Probabilidade de retorno R versus o expoente σ para diversos tamanhos de cadeia ($N=100,200,400$). A probabilidade de retorno toma um valor constante para σ pequeno e cresce com o tamanho da rede quando o valor de σ se aproxima de 1.0

A figura 2.2.1 mostra a probabilidade de retorno assintótico R versus o expoente de decaimento σ , para diversos tamanhos de cadeia ($N=100,200,400$). A probabilidade de retorno toma um valor constante finito para valores pequenos do parâmetro σ , indicando que para estes valores os estados são estendidos. Para valores do expoente σ próximo de 1.0 , a probabilidade de retorno cresce com o tamanho da rede, indicando um caráter localizado dos estados eletrônicos. Este resultado está de acordo com o obtido pela análise do número de participação mostrado na figura 2.3.

Os efeitos relativos ao tamanho finito das cadeias estudadas não nos permitem calcular o valor crítico do expoente de decaimento com uma precisão adequada. Contudo, a flutuação relativa do número de participação η versus o parâmetro de desordem calculados

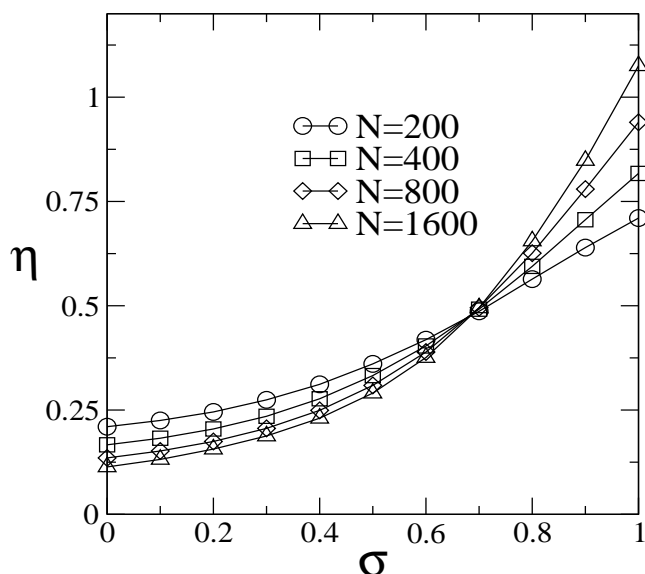


Figura 2.5: Flutuação relativa do número de participação η versus o expoente σ para vários tamanhos de cadeia ($N=200,400,800,1600$). O ponto invariante de escala indica o ponto crítico onde acontece a transição de percolação quântica.

para diversos tamanhos de rede se mostra um dos métodos mais eficientes para o encontro do ponto crítico. A flutuação do número de participação tem um valor pequeno quando os estados são estendidos e seu valor relativo decresce com o aumento do tamanho da cadeia, enquanto que para estados localizados a flutuação independe do tamanho do sistema, e seu valor relativo cresce e satura em um valor finito com o aumento do tamanho da cadeia. No ponto crítico a flutuação relativa do número de participação é invariante de escala.

Na figura 2.2.1 apresentamos a flutuação relativa do número de participação η versus o expoente σ para vários tamanhos de cadeia ($N=200,400,800,1600$). O ponto invariante de escala indica o ponto onde ocorre a transição estendido-localizado dos estados eletrônico. Este resultado corrobora com o obtido com a probabilidade de retorno, e ainda assinala o valor $\sigma_c = 0.68(2)$ como o valor crítico do expoente de decaimento da lei de

potência o qual controla a transição de percolação quântica.

Capítulo 3

Sumário, Conclusões e Perspectivas

Nos capítulos anteriores desta dissertação apresentamos diversos trabalhos que mostra como o conhecimento sobre transporte eletrônico vem evoluindo com o passar dos anos. Nas últimas décadas, novos ingredientes têm surgido e melhorado nossa compreensão sobre o comportamento dos elétrons nos mais diversos sistemas. Ingredientes como a presença de correlações na desordem e interações elétron-fônon tem grande relevância na natureza dos estados eletrônicos. Motivados por estes trabalhos desenvolvemos o estudo apresentado nesta dissertação. Mostraremos, agora os principais resultados obtidos neste trabalho.

Nesta dissertação estudamos o problema de percolação quântica em um sistema unidimensional com ligações de longo alcance. O modelo utilizado foi um sistema de um elétron em uma cadeia diluída cuja a probabilidade de ocorrer uma ligação entre sítios com uma distância r entre si, decai com $p(r) = 1/r^{1+\sigma}$. Utilizamos um formalismo de diagonalização exata e computamos o número de participação ξ , bem como, a densidade de estado (DOS). Utilizamos os autoestados calculados e analisamos a evolução temporal de um pacote de onda eletrônico inicialmente localizado, computando o número de participação dependente do tempo $\xi(t)$, bem como a probabilidade de retorno R . Com

estes resultados verificamos a existência de uma fase de estado estendidos. Encontramos, através da flutuação do número de participação, o valor de $\sigma_c = 0.68$ para o expoente de decaimento crítico, no qual separa a fase estendida da fase localizada. Para valores maiores do que σ_c todos os autoestados são localizados, mesmo existindo um cluster percolante. Esta é a assinatura típica de sistema que apresenta percolação clássica mas não apresenta percolação quântica. Para valores do expoente de decaimento abaixo do valor crítico, os acoplamentos de longo-alcance induz auto-estados estendidos, onde um pacote de onda inicialmente localizado se espalha por toda a cadeia de forma exponencial, atingindo um regime assintótico logo após um curtíssimo período de tempo. O atual modelo de percolação quântica apresentou um valor de expoente crítico, $\sigma_c = 0.68$, maior do que os encontrados em outras classes de modelos com acoplamentos de longo-alcance, como o PRBM (power-law random band matrix) e os modelos com acoplamentos de longo-alcance e desordem diagonal pura. Assim, existe uma faixa de expoentes de decaimento para a qual este modelo de percolação quântica apresenta uma transição metal-isolante que não é encontrada nestes outros modelos. Com isso, a transição de percolação quântica é esperada para estar numa classe de universalidade diferente das classe em que se apresentam as transições de Anderson nos modelos com acoplamentos de longo-alcance, tanto com desordem diagonal pura, quanto com desordem fora da diagonal.

A classe de universalidade das transições de percolação quântica com acoplamentos de longo alcance ainda é uma questão em aberto. Futuramente poderemos melhorar a caracterização da classe de universalidade deste modelo, que pode ser complementada com uma estimativa numérica do expoente do comprimento de correlação.

Apêndice A

A1 - Trabalhos Aceitos

Quantum Percolation of One-Electron States in Power-Law Diluted Chains

M.P. da Silva Jr., S.S. Albuquerque, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra
Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió AL 57072-970, Brazil

Received 22 October, 2007

We investigate the nature of one-electron eigenstates in power-law diluted chains for which the probability of occurrence of a bond between sites separated by a distance r decays as $p(r) = 1/r^{1+\alpha}$. Using an exact diagonalization scheme on finite chains, we compute the spreading of an initially localized wave-packet, the time dependent participation number as well as the return probability. Our results show the existence of a phase of extended states. By considering the scale invariance of the fluctuations of the participation number at the Anderson transition, we obtained that extended states emerges for $\alpha < 0.68$. This limiting value is larger than the one reported in the literature for the emergence of extended states in one-dimensional Anderson models with power-law decaying couplings.

Keywords:

I. INTRODUCTION

The Anderson localization theory describes some relevant aspects concerning the properties of non-interacting electron systems with uniformly distributed disorder. In one-dimensional (1D) and two-dimensional (2D) electronic systems with short-range hopping, the scaling theory [1, 2] predicts the absence of a disorder-driven metal-insulator transition (MIT) for any degree of uncorrelated disorder. On the other hand, when long-range couplings are assumed, a transition from localized to delocalized electronic states can be found even in 1D disordered systems [3, 4]. In this case, one has an interplay between the hopping range and the degree of disorder. The former favors propagation while the later inhibits it. It is worthwhile to mention that propagation of carriers was also obtained in low-dimensional models with short-range hopping but presenting correlated disorder, such as random dimer chains [5–8] and in chains with scale-free disorder [9–11], as well as in chains containing quasi-periodic structures, as for example Fibonacci, Thue-Morse and Harper sequences [12–14].

It was shown that an ordered 1D system with hopping terms decaying with a power-law characterized by an exponent α recovers the result for the tight-binding model for $\alpha > 2$ [15]. More interesting is the behavior corresponding to $0 < \alpha < 1$. For $\alpha = 0$ an initially localized wave-packet presents *self-trapping*, i.e., the particle performs oscillations in a definite region of the lattice, visiting periodically the starting position. By increasing α , the localization is lost. When the power exponent equals unity, and for sufficient short times, the wave-packet diffuses with a diffusion coefficient that increases with the number of sites. This effect is absent in the model with only nearest-neighbor hoppings [15].

More recently, the dynamics of an electron in the one-dimensional Anderson model with non-random hoppings falling off as some power α of the distance between sites was investigated [16]. It was found that the larger the hopping range, the more extended the wave-packet becomes as time evolves. When the disorder is increased, the wave-packet tends to remain more localized. For a low degree of disorder, the exponent $\alpha = 1.5$ indicates the onset for fast propagation.

Moreover, the inclusion of a dc electric field introduces the effect of dynamical localization. The fast propagation found for $\alpha < 1.5$ is in agreement with the reported delocalization of states located close to one of the band edges [17–19].

The power-law random band matrix (PRBM) model also exhibits a delocalization transition [3, 4]. This model describes one-dimensional electronic systems with random long-range hopping amplitudes with standard deviation decaying as $1/r^\alpha$ for sites at a distance $r \gg b$, where b is a typical bandwidth. It was shown that at $\alpha = 1$, this model presents an Anderson-like transition with all states being localized for $\alpha > 1$ and extended for $\alpha < 1$. At the critical point $\alpha = 1$, the inverse participation ratio distribution, the wavefunctions multifractal spectra, the level statistics and the time-evolution of the wave-packet size have been investigated both analytically and numerically [3, 4, 20–23]. Within the same spirit of the PRBM, a model for non-interacting electrons in a 2D lattice with random on-site potentials and random power-law decaying transfer terms was numerically investigated by exploring the finite-size scaling properties of the fluctuations in the mean level spacing [24]. It was found that the one-electron eigenstates become extended for transfer terms decaying slower than $1/r^2$. Finally, the Anderson transition in a 1D chain with random power-law decaying hopping terms and non-random on-site energies was numerically characterized in ref. [25].

Another class of models presenting an Anderson localization corresponds to models for one-electron moving in diluted lattices. The states present the so called quantum percolation transition separating regimes of extended and localized states. The quantum percolation threshold is usually different from the classical percolation point once disorder is more effective in localizing wave-like than particle-like excitations. In this work, we investigate the nature of one-electron eigenstates in power-law diluted chains for which the probability of occurrence of a bond between sites separated by a distance r decays as $p(r) = 1/r^{1+\alpha}$. Although this chain is fully connected through the first-neighbors couplings and, therefore, allows for classical percolation, we will show that the disorder introduced by the dilution of long-range hoppings may localize the one-electron eigenstates. Using an exact diagonalization

scheme, we will provide a detailed analysis of the nature of the one-electron eigenstates and the wave-packet dynamics. Using a finite-size scaling analysis, we will also locate the critical power-law exponent below which extended states emerge in this model.

II. MODEL AND FORMALISM

A. Model Hamiltonian

We consider a single electron in a 1D chain with open boundaries, described by the Anderson Hamiltonian

$$H = \sum_{n=1}^N \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_{n \neq m}^N h(|n-m|) |n\rangle \langle m|, \quad (1)$$

where $|n\rangle$ represents the state with the electron localized at site n . In the present random bond Anderson model, the on-site potentials ε_n are site independent and in Eq. 1 were taken to be $\varepsilon_n = 0$ without any loss of generality. Long-range disorder is introduced by assuming the hopping amplitudes $h(n-m)$ to be distributed following a power-law decaying distribution. The probability of occurrence of a bond between sites n and m decays as

$$p(r = |n-m|) = 1/r^{1+\sigma}. \quad (2)$$

where $h(|n-m|) = 1$ with probability $p(r)$ and $h(|n-m|) = 0$ with probability $1-p(r)$. For $\sigma > 1$ this model is expected to have features similar to those presented by models with random short-range couplings. In this work, we will be particularly interested in the regime of $0 < \sigma < 1$.

B. Eigenfunctions and Participation number

In the following investigation, we will analyze the quantum percolation transition in the above introduced model. The main quantities we used for such purpose were obtained by the direct diagonalization of the Hamiltonian on finite chains which provided all eigenstates and energy eigenvalues for each disorder realization. In studying the nature of the one-electron eigenstates, the participation moments play a central role. For a particular disorder configuration ν and eigenstate, the participation number is defined as the inverse of the second moment of the probability density

$$P^{j,\nu} = \frac{1}{\sum_{n=1}^N |f_n^{j,\nu}|^4} \quad (3)$$

where $f_n^{j,\nu}$ is the amplitude at site n of the j -th eigenstate from the ν -th disorder realization. In our numerical computation, we performed a numerically exact diagonalization on chains with sizes ranging from $N = 200$ up to $N = 1600$ sites. We averaged $P^{j,\nu}$ using all eigenstates computed from distinct disorder realizations:

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{MN} \sum_{\nu=1}^M \sum_{j=1}^N P^{j,\nu}. \quad (4)$$

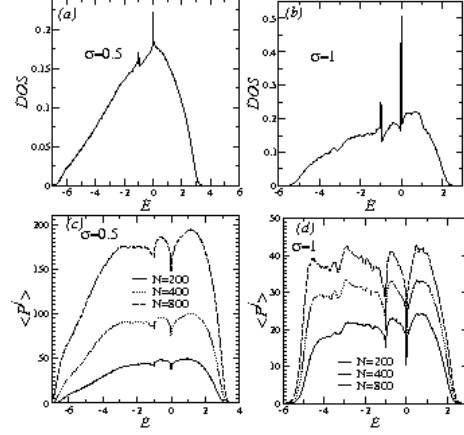


FIG. 1: The normalized density of states DOS versus energy E for $N = 200$ and (a) $\sigma = 0.5$, (b) $\sigma = 1$. Results for DOS were averaged using more than 30000 disorder realizations. The participation number $\langle P^j \rangle$ (averaged over several realizations of disorder) versus energy E for several system sizes ($N = 200$ up to 800), (c) $\sigma = 0.5$ and (d) $\sigma = 1$. For $\sigma = 0.5$ the participation number is proportional to N indicating the presence of extended states. The participation number converges to finite values for $\sigma = 1$. This result suggest a localized nature of all eigenstates.

We use $NM = 64 \times 10^3$ states for each chain size. In addition, we computed the normalized density of states (DOS) defined by $DOS(E) = (1/MN) \sum_{j,\nu} \delta(E - E^{j,\nu})$ and the fluctuation of the participation number defined by

$$\Delta \xi = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2}. \quad (5)$$

The relative fluctuation of the participation number is given by

$$\eta = \Delta \xi / \langle \xi \rangle. \quad (6)$$

Within the framework of random and non-random long-range hopping models, it was demonstrated rigorously that the distribution function of the participation function is scale invariant at the Anderson transition [26]. Such scale invariance has been used to monitor the critical point of long-range hopping models [27] and shall also hold for general models exhibiting a localization-delocalization transition.

C. Wave-packet Dynamics

In order to obtain the time-evolution of an initially localized wave-packet ($|\Phi(t=0)\rangle$), we expanded the wave-function in the Wannier representation

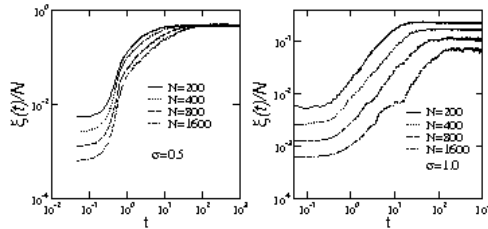


FIG. 2: Scaled participation number ξ_t/N versus time t for several system sizes ($N = 200$ up to 1600), (a) $\sigma = 0.5$ and (b) $\sigma = 1$. For $\sigma = 0.5$ the asymptotic participation number is proportional to N indicating the presence of extended states among the wave-packet components. For $\sigma = 1$, the Scaled participation number ξ_t/N tends to zero as the system size is increased. This result suggests that all eigenstates are localized.

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_n f_n(t)|n\rangle. \quad (7)$$

The main task is to solve the time-dependent Schrödinger equation for the wave-function components $f_n(t)$ ($\hbar = 1$)

$$i \frac{df_n(t)}{dt} = \sum_{m \neq n} h(n-m)f_m(t). \quad (8)$$

Using the numerical formalism proposed in Ref. [28], the general solution of this problem can be written as:

$$|\Phi(t)\rangle = \mathbf{U}^\dagger \exp(-i\mathbf{D}t)\mathbf{U}|\Phi(t=0)\rangle, \quad (9)$$

where \mathbf{D} is the diagonal form of the Hamiltonian and \mathbf{U} is a unitary matrix. In what follows, we consider the electron initially localized in a single site, i.e. $|\Phi(t=0)\rangle = |n_0\rangle$.

Besides following the time evolution of the initially localized wave-packet, we also recorded the asymptotic scaled return probability (return probability times the chain size) defined as:

$$R = \frac{N}{t_{\infty}} \int_0^{t_{\infty}} |f_{n_0}(t)|^2 dt \quad (10)$$

In general R is roughly a constant for extended states and scales proportional to N for localized states. We further calculated the time dependent participation number

$$\xi(t) = \left\langle \frac{1}{\sum_n |f_n(t)|^4} \right\rangle, \quad (11)$$

averaged over distinct realizations. The participation number ($\xi(t)$) has been commonly used as a measurement of the typical number of sites over which the wave-packet is spread.

III. RESULTS

In Fig.1, we show results for the normalized density of states DOS and the participation number. In Fig.1a, we plot

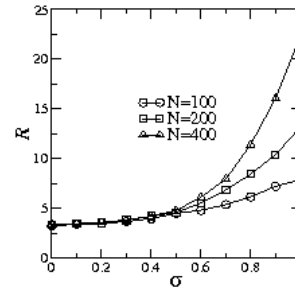


FIG. 3: The asymptotic scaled return probability R versus σ for several system sizes ($N = 100$ up to 400). The scaled return probability R is roughly a constant for small σ and increase with N for σ around unit. This result reinforces the existence of an Anderson transition for $\sigma < 1$.

the normalized density of states DOS versus energy E for $N = 200$ and $\sigma = 0.5$. In Fig.1b, similar data are shown for $\sigma = 1$. Results for the DOS were averaged using more than 30000 disorder realizations. In both cases, two delta-like singularities are observed at $E = 0$ and $E = -1$. These singularities are associated with resonant localized modes which are located at pair of sites with the same bonds to the remaining chain. It is important to notice that for $\sigma = 0.5$ the DOS presents much smaller fluctuations than that for $\sigma = 1$. This feature signals that the typical localization length becomes larger as the couplings are made more long-ranged.

The average participation number $\langle P^j \rangle$ versus energy E for several system sizes ($N = 200$ up to 800) is shown in Fig.1(c) for the particular case of $\sigma = 0.5$. Fig.1(d) show our results for $\sigma = 1$. To compute $\langle P^j \rangle$, we averaged the participation number of all eigenstates j within a small window around E considering several disorder realizations. For $\sigma = 0.5$ the participation number is proportional to N indicating the presence of extended states. The average participation number does not scale proportional to the system size for $\sigma = 1$. This result suggests an asymptotic localized nature of all eigenstates. The dips at $E = 0$ and $E = -1$ are due to the strongly localized nature of the resonant states at these energies.

In Fig.2, we show our results for the scaled participation number ξ_t/N versus time t for several system sizes ($N = 200$ up to 1600), (a) $\sigma = 0.5$ and (b) $\sigma = 1$. For $\sigma = 0.5$ the asymptotic participation number is proportional to N indicating that the wave-packet has components which are extended states. For $\sigma = 1$, the scaled participation number ξ_t/N tends to zero as the system size is increased. This result suggests that all eigenstates have a localized nature. It is important to stress that the asymptotic regime for $\sigma = 0.5$ is reached after a very short evolution time. Due to the presence of long-range hoppings, the initially localized wave-packet spreads exponentially before the saturation.

The above results indicates that a quantum percolation transition is taking place in such power-law diluted chain model

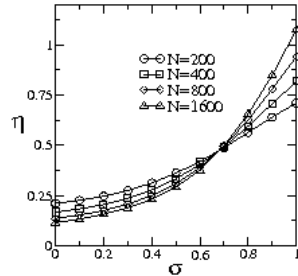


FIG. 4: The relative fluctuation of the participation function $\eta = \Delta \xi / \langle \xi \rangle$ versus σ and $N = 200, 400, 800, 1600$ sites. The scale invariant point signals the transition between extended and exponentially localized states.

The main parameter governing this transition is the power-law decay exponent σ . In order to locate the critical decay exponent, we computed some typical quantities over the full range of $0 < \sigma < 1$. In Fig. 3 we show the asymptotic scaled return probability R versus σ for distinct system sizes ($N = 100$ up to 400). The scaled return probability R is roughly a constant for small σ and increase with N for large σ . In agreement with Fig. 2, this result also indicates the existence of extended states for $\sigma = 0.5$. However, due to the strong finite size effects, such quantity does not allow for an accurate estimate of the critical point. To this end, the relative fluctuation of the participation number plotted as a function of σ using data computed from distinct chain sizes represents one of the most efficient and computationally suited tools. Extended states display very weak participation number fluctuations and, as such, the relative fluctuation decreases with the system size. On the other hand, localized states have size independent fluctuations with the relative value saturating at a finite value as the system size is increased. At the critical point, the participation number distribution is scale invariant. In Fig. 4, we collect results of the relative fluctuation of the participation function $\eta = \Delta \xi / \langle \xi \rangle$ versus σ with $N = 200, 400, 800, 1600$ sites. The scale invariant point around $\sigma = 0.68(2)$ signals the transition between extended and exponentially localized states.

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

In summary, we investigated the nature of one-electron eigenstates in power-law diluted chains for which the prob-

ability of occurrence of a bond between sites separated by a distance r decays a $p(r) = 1/r^{1+\sigma}$. This model is a prototype to study the quantum percolation transition in low-dimensional systems with long-range couplings. Using an exact diagonalization scheme on finite chains, we computed the DOS and participation number of all energy eigenstates which were used to follow the time-evolution of an initially localized wave-packet. We found that the relative fluctuation of the participation number provides a precise estimate of the critical decay exponent $\sigma_c = 0.68(2)$ separating the regimes of localized and extended states. For decay exponents larger than this critical value, all energy eigenstates are localized, a behavior typical of disordered systems with short-range couplings. It is important to stress that in this regime the wave-packet remains localized over a finite region of the system even though the chain is fully connected. This is a typical signature of systems presenting classical percolation but no quantum percolation. For σ below the critical value, the long-range couplings are enough to stabilize extended states. An initially wave-packet develops a fast exponential spread over the chain. As compared with other classes of models with long-range couplings, such as the random band matrix model and models with long-range couplings and pure diagonal disorder, the present model is the one on which the phase of extended states is sustained for the widest range of decay exponents. Therefore, there is a range of decay exponents for which the present quantum percolation model exhibits a localization-delocalization transition that is not shared by these other models. A σ -dependent set of new critical exponents shall govern this unique transition. Within this scenario, the quantum percolation transition here reported is expected to belong to a universality class distinct from the two classes governing the Anderson transition in models with long-range couplings with pure diagonal as well as off-diagonal disorder. We expect the present results can stimulate further studies along this direction.

V. ACKNOWLEDGEMENTS

This work was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, Rede Nanobioestruturas, CAPES and FINEP and by the Alagoas State research agency RAPEAL.

- [1] P.W. Anderson Phys. Rev. **109**, (1958) 1492.
 [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979). For a review see, e.g., I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, and L.A. Pastur, *Introduc-*

tion to the Theory of Disordered Systems (Wiley, New York, 1988).

- [3] A.D. Mirlin, Y.V. Fyodorov, F.-M. Dittes, J. Quezada, and T.H. Seligman, Phys. Rev. E **54**, 3221 (1996).

- [4] A.D. Mirlin and F. Evers, *Phys. Rev. B* **62**, 7920 (2000); F. Evers and A.D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3690 (2000).
- [5] J.C. Flores, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 8471 (1989).
- [6] D.H. Dunlap, H.L. Wu, and P.W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 38 (1990); H.-L. Wu and P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1366 (1991); P.W. Phillips and H.-L. Wu, *Science* **252**, 1805 (1991);
- [7] C.A.A. da Silva, P.E. de Brito, and H.N. Nazareno, *Phys. Rev. B* **52**, 7775 (1995).
- [8] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Paravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999).
- [9] F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998); F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, *Physica A* **266**, 465 (1999).
- [10] F.M. Izrailev and A.A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999); F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, and S.E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 041102(R) (2001).
- [11] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, and M.L. Lyra, *Europhys. Lett.* **66**, 585 (2004).
- [12] P.E. de Brito, C.A.A. da Silva, and H.N. Nazareno, *Phys. Rev. B* **51**, 6096 (1995).
- [13] H.N. Nazareno, P.E. de Brito, and C.A.A. da Silva, *Phys. Rev. B* **51**, 864 (1995).
- [14] C.S. Ryu, G.Y. Oh, and M.H. Lee, *Phys. Rev. B* **48**, 132 (1993).
- [15] H.N. Nazareno and P.E. de Brito, *Phys. Rev. B* **60**, 4629 (1999).
- [16] P.E. de Brito, E.S. Rodrigues, and H.N. Nazareno, *Phys. Rev. B* **69**, 214204 (2004).
- [17] A. Rodríguez, V.A. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, L161 (2000).
- [18] A. Rodríguez, V.A. Malyshev, G. Sierra, M.A. Martín-Delgado, J. Rodríguez-Laguna, and F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 27404 (2003).
- [19] A.V. Malyshev, V.A. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* **70**, 172202 (2004).
- [20] R.P.A. Lima, M.L. Lyra, and J.C. Cressoni, *Physica A* **295**, 154 (2001).
- [21] F.M. Izrailev, T. Kottos, A. Politi, S. Ruffo, and G.P. Tsironis, *Europhys. Lett.* **34**, 441 (1996).
- [22] F.M. Izrailev, T. Kottos, A. Politi, and G.P. Tsironis, *Phys. Rev. E* **55**, 4951 (1997).
- [23] A. Politi, S. Ruffo, and L. Tessieri, *Eur. Phys. J. B* **14**, 673 (2000).
- [24] H. Potempa and L. Schweitzer, *Phys. Rev. B* **65**, 201105(R) (2001).
- [25] R.P.A. Lima, H.R. da Cruz, J.C. Cressoni, and M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* **69**, 165117 (2004).
- [26] F. Evers and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3690 (2000); *ibid* *Phys. Rev. B* **62**, 7920 (2000).
- [27] A. V. Malyshev, V. A. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* **70**, 172202 (2004).
- [28] H.N. Nazareno, P.E. de Brito, and E.S. Rodrigues, *Phys. Rev. B* **68**, 054204 (2003).

Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. G. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [3] Mahito Kohmoto, Phys. Rev. Lett. **51**, 1198 (1983).
- [4] J. C. Flores, J. Phys. Condens. Matter. **1**, 8471 (1989).
- [5] D. H. Dunlap, H. L. Wu e P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [6] F.A.B.F. de Moura e M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett, **81**, 3735 (1998).
- [7] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand e E.D. Siggia, Phys. Rev. Lett. **50**, 1873 (1983).
- [8] M. Ya. Azbel, Phys. Rev. Lett. **43**, 1954 (1979).
- [9] J. B. Solokoff, Phys. Rev. B. **22**, 5823 (1980).
- [10] C. M. Soukoulis e E. N. Economou, Phys. Rev. Lett. **48**, 1043 (1982).
- [11] D. R. Grempel, S. Fishman e R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. **49**, 833 (1982).
- [12] M. Griniasty e S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988).

-
- [13] S. Das Sarma, Song He e X. C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988).
- [14] D. J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988).
- [15] S. Das Sarma, Song He e X.C.Xie, Phys. Rev. B. **41**, 5544 (1990).
- [16] P. Carpena, P. Bernaola-Galán, P.Ch. Ivanov e H.E. Stanley, Nature **418**, 955 (2002).
- [17] D. K. Ferry e S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge, New York, 1997).
- [18] R. Abou-Chacra, P. W. Anderson e D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1734 (1973).
- [19] A. D. Mirlin e Y. V. Fyodorov, J. Phys. I **4**, 655 (1994).
- [20] S. N. Evangelou e D. E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992); S. N. Evangelou, A. Z. Wang, S. J. Xiong, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4937 (1994).
- [21] P. K. Datta, K. Kundu, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4465 (1994).
- [22] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid States Physics* (Saunders College, New York, 1976).
- [23] D. M. Cladio e J.M. Martins, Cálculo Numérico Computacional, (Editora Atlas 1994).
- [24] D. J. Thouless, Physics Reports **13**, 93 (1974).
- [25] B. Kramer e A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [26] F. Wegner, Z. Phys. B **25**, 327 (1976).
- [27] K. Slevin, T. Ohtsuki e T. Kawarabayashi, Phys. Rev. Lett. **84**, 3915 (2000).
- [28] K. Slevin e T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 (2001).

-
- [29] K. Slevin, P. Marko e T. Ohtsuki, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3594 (2001).
- [30] S. L. A. de Queiroz, *Phys. Rev. B* **63**, 214202 (2001).
- [31] D. Belitz e T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 281 (1994).
- [32] 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).
- [33] S. Bogdanovich, M. P. Sarachik e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 137 (1999).
- [34] G. Theodorou, M. H. Cohen, *Phys. Rev. B* **13**, 4957 (1976).
- [35] L. Fleishman, e D. C. Licciardello, *J. Phys. C* **10**, L125 (1977).
- [36] C. M. Soukoulis, e E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **24**, 5698 (1981).
- [37] M. Hilke, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 4773 (1994).
- [38] F. M. Izrailev e A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
- [39] S. Russ, J. W. Kantelhardt, A. Bunde, S. Havlin e I. Webman, *Physica A* **266**, 492 (1999).
- [40] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. Krokhin e H. J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 663 (2000).
- [41] H. Shima, T. Nomura e T. Nakayama, *Phys. Rev. B* **70**, 075116 (2005).
- [42] F.A.B.F de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo e M. L. Lyra, *Europhys. Lett.* **66**, 585 (2004).

-
- [43] B. Santos, L. P. Viana, M. L. Lyra e F.A.B.F de Moura, Solid State Comun **138**, 585 (2006).
- [44] E. L. Albuquerque, M. L. Vasconcelos, M. L. Lyra e F.A.B.F de Moura, Phys. Rev. E **71**, 021910 (2005)
- [45] F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F.A.B.F de Moura e M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **91**, 197402 (2003).
- [46] L. S. Schulman, J. Phys. A **16**, L639 (1983).
- [47] C. M. Newman e L. S. Schulman, Commun. Math. Phys. **104**, 547 (1986).
- [48] M. Aizenman e C. M. Newman, Commun. Math. Phys. **107**, 611 (1986).
- [49] S. Kirkpatrick e T P. Eggarter, Phys Reb B **6**, 3598 (1972).
- [50] A. Mookerjee, I. Das Gupta e T. Saha, Int. J. Mod. Phys. B **9**, 2989 (1985).
- [51] M. Inui, S. A. Trugman e E. Abrahams, Phys Lett. B **49**, 3190(1994).
- [52] S. Das Sarma, P. M. Lilly, E. H. Hwang, L. N. Pfeiffer, K. W. West e J. L. Remo, Phys. Rev. Lett. **94**, 136401 (2005).
- [53] Y. Dubi, Y. Meir, Y. Avisha, Phys. Rev. B **71**, 125311 (2005).
- [54] N. Sandler, H. Maei e J. Kondev, Phys. Rev. B **70**, 045309 (2004).
- [55] L. J. Root, J. D. Bauer e J. L. Skinner, Phys. Rev. B **37**, 5518 (1988).
- [56] K. C. Chang e T. Odagaki, J. Phys. A **20**, 1027 (1987).
- [57] C. M. Soukolis, Q. Li e G. S. Grest, Phys. Rev. B **45**, 4685 (1992).

-
- [58] R. Berkovits e Y. Avishai, Phys. Rev. B **53**, 16125 (1996).
- [59] A. Kaneko e T. Ohtsuki, J. Phys. Soc. Japan **68**, 1488 (1999).
- [60] R. P. A. Lima, M. L. Lyra, Physica A **291**, 157 (2001).
- [61] A. D. Mirlin, Y. V. Fyodorov, F. -M. Dittes, J. Quezada e T. H. Seligman, Phys. Rev. E **54**, 3231 (1996).
- [62] A. D. Mirlin e F. Evers, Phys. Rev. B **62**, 7920 (2000); F. Evers e A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **84**, 3690 (2000).
- [63] R. P. A. Lima, M. L. Lyra, e J. C. Cressoni, Physica A textbf295, 295 (2001).
- [64] A. Politi, S. Ruffo e L. Tessiere, Eur. Phys. J. B **14**, 673 (2000).
- [65] H. N. Nazareno, P. E. de Brito e E. S. Rodriguez, Phys. Rev. B **68**, 054204 (2003)