

Transporte em Baixa Dimensionalidade na presença de Não-Linearidade e Desordem

ILDEMIR FERREIRA DOS SANTOS

ILDEMIR FERREIRA DOS SANTOS

Transporte em Baixa Dimensionalidade na
presença de Não-Linearidade e Desordem

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

Orientador:

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Co-Orientador:

Prof. Marcelo Leite Lyra

Maceió - Brasil

Dezembro - 2009

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

S237t Santos, Ildemir Ferreira dos Santos.
Transporte em baixa dimensionalidade na presença de não-linearidade e
Desordem / Ildemir Ferreira dos Santos, 2009.
85 f. : il., grafs.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura
Co-orientador: Marcelo Leite Lyra
Tese (doutorado em Física da Matéria Condensada) – Universidade
Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2009.

Bibliografia: f. [80]-85

1. Física da matéria condensada. 2. Processos de transporte eletrônico.
3. Modelo de Anderson. I. Título.

CDU: 538.935



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

BR 104 km 14, Campus A.C. Simões
Cidade Universitária
Tabuleiro dos Martins
57072-970 Maceió - AL, Brasil
Fone : (82) 3214-1423

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
TESE DE DOUTORADO**

**"TRANSPORTE EM BAIXA DIMENSIONALIDADE NA PRESENÇA
DE NÃO-LINEARIDADE E DESORDEM"**

por

Ildemir Ferreira dos Santos

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), da Universidade Federal de Alagoas, Marcelo Leite Lyra (co-orientador), da Universidade Federal de Alagoas, Ítalo Marcos Nunes de Oliveira, da Universidade Federal de Alagoas, Rodrigo André Caetano, da Universidade Federal de Alagoas, Samuel Silva de Albuquerque, da Universidade Federal de Alagoas/Pólo Arapiraca e Paulo Henrique Ribeiro Barbosa, da Universidade Federal do Piauí, consideram o candidato aprovado com grau "A".

Maceió, 18 de dezembro de 2009

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Prof. Marcelo Leite Lyra

Prof. Ítalo Marcos Nunes de Oliveira

Prof. Rodrigo André Caetano

Prof. Samuel Silva de Albuquerque

Prof. Paulo Henrique Ribeiro Barbosa

Em memória da pessoa que mais me incentivou e que mais me inspirou a sempre continuar. Nada apagará de minha mente seus ensinamentos e nada apagará do meu coração a saudade que dela sinto, este trabalho dedico a minha mãe, *Maria*.

AGRADECIMENTOS

Meu tempo de doutorado certamente foi o período mais difícil da minha vida acadêmica. Sem as pessoas que citarei de forma resumida certamente eu não teria conseguido, então a elas meus sinceros agradecimentos hoje e sempre:

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

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

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

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

Agradeço a meu pai Isaías, pelo apoio incondicional em todos os momentos da minha vida e pela confiança que sempre depositou em mim.

Agradeço a Marta e a Indianara. Certamente minha família era meu ponto de apoio em momentos difíceis, onde recarregar energias para voltar a lutar outra vez.

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

Agradeço a todos os amigos que fiz no IF neste período de mestrado e doutorado, aos que vieram junto comigo do Piauí, mas em especial agradeço a meus grandes amigos: Marcelo Felisberto, Geraldo, Adriano, Wagner, Jorge, Agnaldo, César, Askery e Cícero Rita.

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

Agradeço aos meus amigos e irmãos da Igreja Batista da Serraria: Wellington, Claudemir, Wilmar e tantos outros.

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

Agradeço a Deus por ter estado sempre comigo e por ter tido a oportunidade de ter um encontro pessoal com Jesus na cidade de Maceió.

Resumo

Nesta tese de doutorado queremos considerar efeitos de não linearidade e desordem correlacionada em sistemas eletrônicos em baixa dimensionalidade. Nós estudamos a dinâmica de um pacote de onda eletrônico em uma cadeia com uma interação elétron-fônon não adiabática. O acoplamento elétron-fônon considerado na equação de Schrödinger depende do tempo por uma não-linearidade cúbica retardada. No limite de um acoplamento adiabático, o fenômeno de auto-aprisionamento ocorre quando o parâmetro de não-linearidade excede um valor crítico da ordem da largura da banda. Nós mostramos que uma não-linearidade fraca é necessária para produzir auto-aprisionamento em regime de tempos curtos de retardo. No entanto, esta tendência é invertida para resposta não linear lenta, resultando em um diagrama de fase reentrante. Em meios que respondem lentamente, o auto-aprisionamento surge apenas para não linearidades muito fortes. Em adicional, nós trazemos o modelo de Anderson bidimensional com desordem correlacionada. Voltamos nossa atenção para um modelo com desordem diagonal diluída por uma periodicidade subjacente. O modelo consiste de duas subredes interpenetrantes, uma composta de potenciais aleatórios (rede de Anderson) e a outra composta de potenciais não aleatórios constantes. Usando cálculos numéricos nós calculamos as propriedades de localização e fornecemos uma estimativa da distribuição dos espaçamentos de níveis. Dentro da nossa precisão numérica nós demonstramos que os estados próximos ao centro da banda obedecem a uma distribuição do tipo Wigner. Para desordem fortes uma distribuição dos espaçamentos de níveis intermediária do tipo Poisson-Wigner é obtida.

Palavras-chave: desordem, não-linearidade, modelo de Anderson.

Abstract

In this PhD thesis we consider the effect of nonlinearity and correlated disorder in low-dimensional electronic systems. We study the dynamics of one electron wave packet in a chain with a nonadiabatic electron-phonon interaction. The electron-phonon coupling is taken into account in the time-dependent Schrödinger equation by a delayed cubic nonlinearity. In the limit of an adiabatic coupling, the self-trapping phenomenon occurs when the nonlinearity parameter exceeds a critical value of the order of the bandwidth. We show that a weaker nonlinearity is required to produce self-trapping in the regime of short delay times. However, this trend is reversed for slow nonlinear responses, resulting in a reentrant phase diagram. In slowly responding media, self-trapping only takes place for very strong nonlinearities. In addition we consider the two-dimensional Anderson model with correlated disorder. We bring our attention to an Anderson model with diagonal disorder diluted by an underlying periodicity. The model consists of two interpenetrating sublattices, one composed of random potentials (Anderson lattice) and the other composed of non-random constant potentials. By using numerical calculations we compute the localization properties and provide accurate estimates of the level spacing distribution. Within our numerical precision we demonstrate that the states close to band center obey a Wigner-Like distribution. For strong disorder an intermediate Poisson-Wigner-Like level spacing distribution is obtained.

keywords: disorder, nonlinearity, Anderson model.

Sumário

Folha de rosto	1
Dedicatória	2
Agradecimentos	3
Resumo	5
Abstract	6
Sumário	7
1 Teoria	9
1.1 Introdução	9
1.2 Transição Metal Isolante	11
1.2.1 O modelo de Bloch	13
1.2.2 Transição de Mott	18
1.2.3 Transição de Anderson	20
1.3 O modelo de Anderson	25
1.3.1 Teoria de Escala para a Transição de Anderson	27
1.3.2 Violação da Teoria de Escala	31
2 Espalhamento eletrônico através da interação elétron-fônon com atraso	37
2.1 Introdução	37
2.1.1 Sistemas não Lineares	38
2.2 Estudo da dinâmica eletrônica em sistema com interação elétron-fônon	44
2.2.1 Introdução	44
2.2.2 Modelo	47
2.2.3 Resultados	48
3 Comportamento dinâmico e estatística dos níveis no Modelo de Anderson bidimensional com desordem diluída	58
3.1 Desordem Diluída	58

SUMÁRIO	8
3.2 Modelo de Anderson bidimensional com desordem diluída	66
3.3 Resultados	69
4 Conclusão	77
Referências	80

Capítulo 1

Teoria

1.1 Introdução

As propriedades de transporte eletrônico em sólidos têm sido objeto de intenso estudo para físicos teóricos e experimentais nos últimos anos. Isso se deve ao fato da grande aplicabilidade do conhecimento obtido com este estudo, que pode proporcionar avanços científicos e tecnológicos. Neste contexto, as propriedades de transporte eletrônico em estruturas cristalinas, possui resultados bem conhecidos como função de onda estendida pelo sistema. Porém grande parte dos sólidos com os quais pode-se trabalhar, obtidos de forma natural ou em laboratório, não são cristalinos. Ao contrário, grande parte dos sólidos possui impurezas ou imperfeições que podem influenciar diretamente nas propriedades de condução eletrônica em um material.

Em termos de propriedades de transporte eletrônico, um material pode apresentar características de condutor ou de isolante, com função de onda eletrônica respectivamente estendida ou localizada. Fatores como a desordem e a não-linearidade podem causar a localização da função de onda eletrônica provocando mudanças nas propriedades de condução do material.

No estudo das propriedades de transporte em materiais com desordem de caráter estrutural ou composicional, é frequentemente utilizado o modelo criado por Anderson[1]. O que tem sido reportado na literatura, com o uso do modelo de Anderson, é que a distribuição da desordem pode influenciar no comportamento do material, no que diz respeito às suas propriedades de condução. Um sistema cuja distribuição da desordem possui correlação é chamado recozido, se não houver correlação é chamado temperado. O arranjo atômico

em sistemas temperados é obtido através de processos de resfriamento brusco a partir de altas temperaturas, a distribuição das impurezas sobre os sítios portanto não mantém correlação. Já em sistemas recozidos a distribuição das impurezas é obtida com um resfriamento lento, de tal forma a minimizar a energia livre do sistema. O sistema portanto não perde correlações e a distribuição não será completamente aleatória. Como veremos no decorrer do trabalho, um sistema com desordem correlacionada pode apresentar características bem distintas em relação a sistemas onde a distribuição da desordem é descorrelacionada.

A não-linearidade é outro fator que pode causar localização espacial da função. Este fator, no contexto abordado neste trabalho é oriundo da interação elétron-fônon. Frequentemente o problema de estudar transporte eletrônico, com influencia do acoplamento elétron-fônon, é abordado com o uso da Equação não-linear de Schrödinger (ENLS) em sua forma discreta, que se mostrará no decorrer deste trabalho, útil para estudar outros sistemas cujo estudo se baseia na mesma equação. A principal propriedade da ENLS é o fenômeno conhecido como auto-aprisionamento (*self-trapping*) da função de onda, fenômeno indispensável no entendimento das propriedades de transporte quando o acoplamento elétron-fônon é considerado.

Neste capítulo mostraremos os aspectos básicos da transição de Anderson, induzida por desordem. Veremos também aspectos do efeito da não-linearidade. Daremos portanto no primeiro capítulo uma introdução geral do que será abordado no decorrer do trabalho, localizando o problema na literatura. O capítulo dois é dedicado ao problema da interação elétron fônon com atraso, onde apresentamos um estudo da dinâmica de um pacote de onda inicialmente localizado em um sistema unidimensional. Para este sistema, o caso em que a resposta a não linearidade é instantânea já é conhecido e exhibe importantes resultados. A proposta então, é estudar os efeitos no espalhamento do pacote de onda quando a resposta a não linearidade não é instantânea, o que produziu resultados novos e muito interessantes. No capítulo três mostraremos o estudo de um sistema bidimensional, usando o modelo de Anderson com desordem diluída. Neste sistema bidimensional estaremos interessados em estudar as propriedades de transporte quando temos duas sub-redes interpenetrantes. Uma das sub-redes tem potenciais constantes e outra, potenciais aleatórios. Este tipo de configuração pode ser chamada de desordem diluída. Finalmente no capítulo quatro apresentaremos as conclusões.

1.2 Transição Metal Isolante

Nesta seção descreveremos os aspectos básicos de localização e da transição metal isolante, fenômeno cujo entendimento se torna indispensável para que se possa compreender as propriedades de transporte eletrônico.

Uma característica da mudança de regime metal-isolante é a localização da função da onda eletrônica. Em um metal a função de onda eletrônica é estendida, e muitos sítios da rede participam da função de onda. Uma função de onda localizada, com poucos sítios participando da função de onda, é uma característica de um regime isolante.

Alguns fatores podem causar a localização, entre eles está a desordem [1], a não linearidade [2] e o caos [3].

Neste trabalho trataremos de problemas que envolvem não-linearidade e desordem, por isso comentaremos de forma breve o problema que envolve o caos.

Em sistemas descritos por Hamiltonianos clássicos, pode ser feita distinção entre dois tipos de movimento: o regular e o caótico. No movimento caótico há uma rápida perda da correlação, o que pode ser observada devido a uma divergência entre trajetórias semelhantes. A distância entre essas trajetórias aumenta de forma exponencial. A razão na qual este aumento acontece é medida por um expoente, o expoente Lyapunov. Em um movimento regular essa distância pode aumentar, com um aumento na forma polinomial mas nunca exponencial. Em mecânica quântica estas classificações perdem o sentido, o conceito de trajetória não é bem definido devido ao princípio da incerteza. Outra dificuldade em definir o caos quântico reside no fato de que a evolução quântica é unitária, e sob um mesmo Hamiltoniano teremos $|\langle \phi(t) | \Psi(t) \rangle|^2 = |\langle \phi(0) | \Psi(0) \rangle|^2$.

Não é possível portanto usar trajetórias, fazendo um comparativo com o aumento das distâncias entre elas como no caso clássico, para estudar o caos quântico. Para estudar este tipo de problema portanto, é usado o princípio da correspondência de Bhor. Este princípio diz que no limite de $\hbar \rightarrow 0$, os resultados clássicos e quânticos devem concordar. Podemos então estudar o caos quântico procurando traços do caos clássico em sistemas quânticos.

Há um exemplo clássico que representa bem esta idéia, com um análogo quântico. Podemos imaginar um rotor, constituído por uma barra com momento de inércia I , pivoteado por uma das suas extremidades. A barra é então impulsionada várias vezes de forma a produzir um movimento caótico. Quando isso acontece o ganho de energia potencial da barra diminui muito e por conseqüência, o seu movimento também diminui.

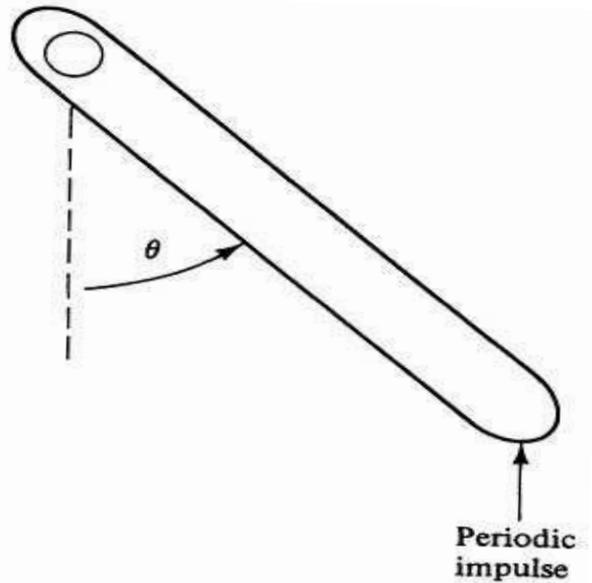


Figura 1.1: Esquema do rotor, não há atrito na parte pivotada. O rotor tem posição angular dada por θ e está sujeito a impulsos periódicos, figura retirada da ref.[4]

Ocorreu uma localização devido ao movimento caótico. Experimentos tem sido feitos com partículas pulsadas em redes óticas, que é análogo ao problema do rotor clássico. Estas experiências têm confirmado os efeitos da localização devido a dinâmica caótica em sistemas quânticos[5, 6]. Pode ser encontrada ainda, uma ampla discussão sobre a localização devido ao caos nas referências [7, 4]. Um mapeamento ligando o problema do rotor ao problema da localização de Anderson, um problema com tratamento quântico, é encontrada na referência[8]. Uma outra forma de observar se o sistema quântico é caótico ou não, é observar a distribuição dos espaçamento dos níveis. Para um sistema quântico regular a distribuição é do tipo Poisson, mas para um sistema caótico a distribuição geralmente é do tipo Wigner[7].

Neste trabalho no entanto, lidamos apenas com localização devido a desordem e a não linearidade, que serão abordadas de forma mais profunda.

A não-linearidade pode causar localização da função de onda[9]. Quando efeitos de interações no sistema são considerados, a não linearidade pode aparecer na equação dinâmica do sistema. No caso de transporte eletrônico, no qual o elétron interage com as vibrações da rede, é introduzido um termo não-linear na equação de Schrödinger [9, 10]. Outro exemplo no qual surge esse efeito é na propagação de feixes ópticos em guias de

onda, onde o meio de propagação pode ter um coeficiente dielétrico não linear[11]. Todos estes sistemas podem ser descritos pela ENLS:

$$i\frac{\partial\psi_n}{\partial t} = \chi|\psi_n|^2 + \epsilon_n\psi_n + V(\psi_{n-1} + \psi_{n+1}), \quad (1.1)$$

que será discutida com maiores detalhes no capítulo dois. A principal propriedade da ENLS é um fenômeno conhecido como auto-aprisionamento (*self-trapping*). Um sistema com interação elétron-fônon, dependendo da intensidade do acoplamento não-linear, pode exibir localização da função de onda eletrônica. A função de onda está, neste caso, aprisionada em uma região. Podemos tentar entender como acontece tal fenômeno, ao imaginarmos um sólido cujos átomos estão vibrando constantemente. Estas vibrações da rede são os fônons. As vibrações deslocam os átomos das suas posições de equilíbrio, o que altera a interação do elétrons com os átomos. O elétron que se propaga na rede interage de forma diferente com um átomo que está oscilando em torno de sua posição de equilíbrio. Esse efeito pode causar interferência na função de onda e provocar o auto-aprisionamento.

Maiores detalhes sobre a ENLS e suas propriedades serão dadas no capítulo seguinte. A partir de agora mostraremos as principais propriedades da transição metal isolante que acontece na física do estado sólido de sistemas cristalinos e materiais amorfos.

1.2.1 O modelo de Bloch

Sistemas puros ou cristalinos representam uma pequena parcela dos sistemas físicos reais. Na grande maioria das vezes, o sistema apresenta algum tipo de desordem estrutural ou composicional. No entanto o modelo de Bloch contém ingredientes necessários para o estudo dos estados estacionários de um elétron em um potencial cristalino, o qual apresenta periodicidade. Podemos pensar inicialmente no modelo do elétron livre. Neste caso o elétron não encontra obstáculo a sua propagação, a função de onda é uma onda plana. Os valores permitidos de energia são infinitos:

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.2)$$

com função de onda dada por

$$\psi_k = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (1.3)$$

Se introduzirmos, no modelo do elétron livre, um potencial periódico de núcleos iônicos ocorrerão as chamadas reflexões de Bragg. A função de onda ao se propagar no

sistema, encontrará agora barreiras e parte da onda será transmitida e parte será refletida. A função de onda pode ser dada por um arranjo simétrico e anti-simétrico das funções de onda do modelo do elétron livre, com ondas se propagando em direções opostas. Teremos então, em uma dimensão:

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

$$\psi(-) = \exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a) = 2i\sin(\pi x/a), \quad (1.5)$$

as quais são ondas estacionárias formadas por porções iguais de ondas que se propagam para a direita e para a esquerda, resultado das reflexões. O gráfico da Fig.1.2, mostra o potencial típico cristalino e as amplitudes de probabilidade respectivas $|\psi(+)|^2$ e $|\psi(-)|^2$.

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

O problema de elétrons em sólidos é, em princípio, um problema de muitos corpos que interagem. A forma da interação é em geral complicada, dificultando o tratamento teórico. Uma descrição mais completa sobre este problema deveria levar em conta interações do tipo elétron-elétron, elétron-íon, desprezadas nos modelos de Drude e Sommerfeld. Uma forma de abordar o estudo destes sistemas é usar a aproximação de elétrons independentes, onde as interações são representadas por um potencial efetivo $U(r)$. Nesta aproximação, considerando uma estrutura cristalina, estas interações efetivas passam a ser representadas por um potencial $U(r)$ periódico. Neste caso, a complexidade do potencial devido a várias interações pode ser desprezada. O padrão deste potencial é mostrado na figura Fig.1.2. Uma descrição mais completa sobre este assunto, pode ser encontrada na referência ref.[12].

Os estados estacionários de um elétron, nesta descrição, podem ser obtidos a partir da equação de Schrödinger:

$$H\psi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi = E\psi. \quad (1.6)$$

Cada elétron é descrito por uma equação de Schrödinger com potencial periódico $U(r)$. Estes elétrons são chamados de elétrons de Bloch. A equação de Schrödinger para o elétron livre é um caso particular da Eq.1.6 fazendo o potencial igual a zero, que é um exemplo simples de periodicidade. Os estados estacionários $\psi(r)$ do Hamiltoniano de um

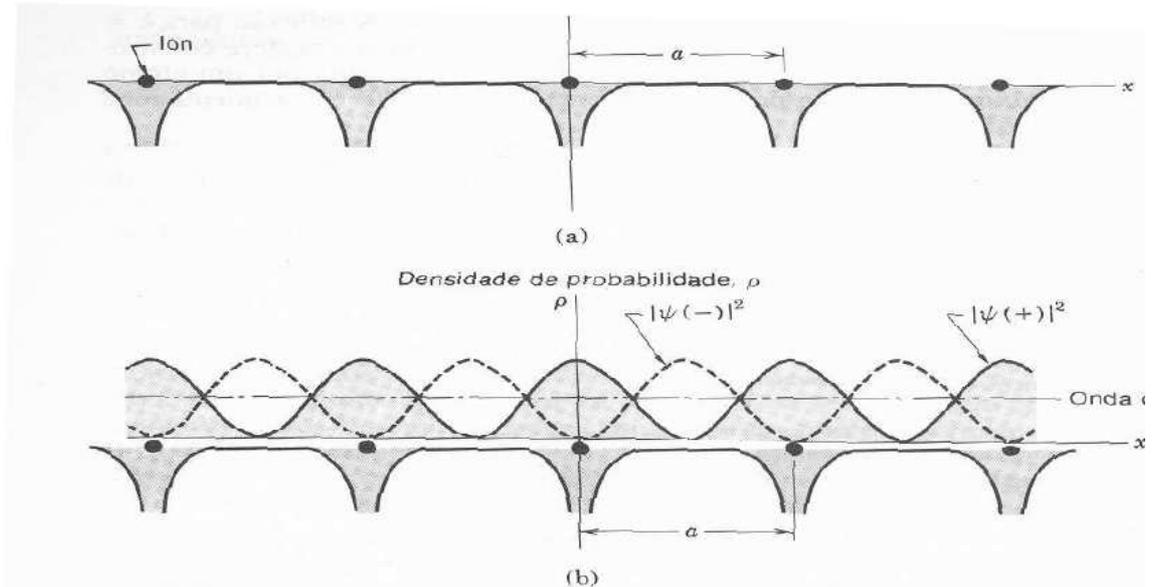


Figura 1.2: Padrão típico de um potencial cristalino, retirada da ref.[12].

único elétron $H = p^2/2m + U(r)$ podem ser escolhidos tendo a forma de uma onda plana vezes uma função que contém a periodicidade da Rede de Bravais:

$$\psi_{n,k}(r) = e^{ik \cdot r} u_{n,k}(r), \quad (1.7)$$

onde

$$u(r + R) = u(r), \quad (1.8)$$

e R é um vetor de Bravais. Os estados $\psi_{n,k}(r)$ são os conhecidos estados de Bloch. Equivalentemente, os auto-estados de H podem satisfazer a:

$$\psi(r + R) = e^{ik \cdot R} \psi(r). \quad (1.9)$$

Os auto-estados de Bloch envolvem um vetor de onda k que tem propriedades semelhantes ao vetor de onda k do modelo do elétron livre. Note entretanto que, no modelo do elétron livre o vetor de onda é simplesmente p/\hbar , onde p é o momento linear do elétron. Na teoria de Bloch podemos visualizar o vetor de onda k como um número quântico que caracteriza as invariâncias translacionais de um potencial periódico. O índice n aparece no teorema de Bloch pois para um dado k existem muitas soluções para a equação de Schrödinger. Para cada índice quântico n , o conjunto de níveis eletrônicos especificados

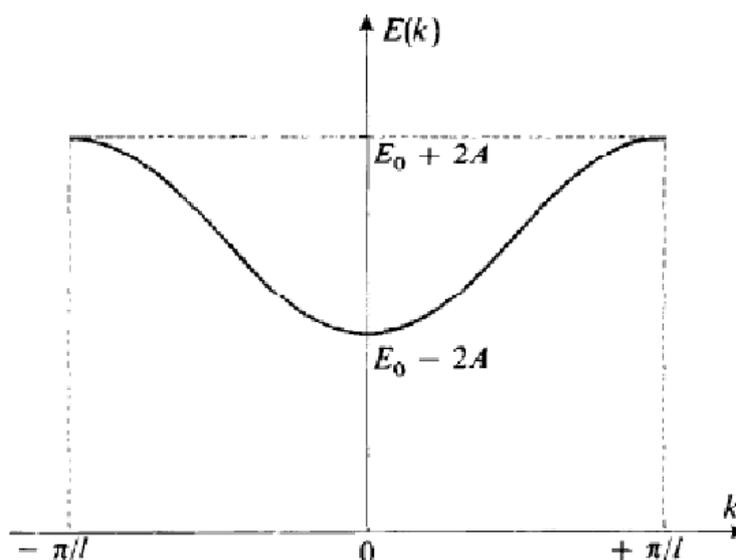


Figura 1.3: Energias permitidas para um elétron.

por $E_n(k)$ é chamado de banda de energia. Cada banda contém $2N$ orbitais onde N é o número de células primitivas no cristal e o fator 2 vem da degenerescência de spin. Se houver um único átomo de valência por célula primitiva, a banda pode ser preenchida até a metade com elétrons. Se contribuir com dois, a banda pode ser preenchida completamente, pois preencheria todos os $2N$ orbitais. Materiais com bandas completamente cheias ou completamente vazias são isolantes porque assim, nenhum elétron poderia se mover sob a ação de um campo elétrico. Se a banda estiver parcialmente preenchida, o material é um condutor.

Quando resolvemos o Hamiltoniano para um determinado modelo que descreve o comportamento de um sólido, encontramos o espectro de energias permitidas para o sistema. Essas energias permitidas são as chamadas bandas de energia. A forma como as bandas de energia estão dispostas nos sólidos é diferente para metais e isolantes.

Em uma cadeia linear, em relação a disposição dos íons que produzem os potenciais, a solução da equação de autovalores fornece para a energia [13]:

$$E = E(k) = E_0 - 2A \cos(kl), \quad (1.10)$$

onde k tem dimensão de inverso de comprimento, l é a distância entre íons adjacentes e A é

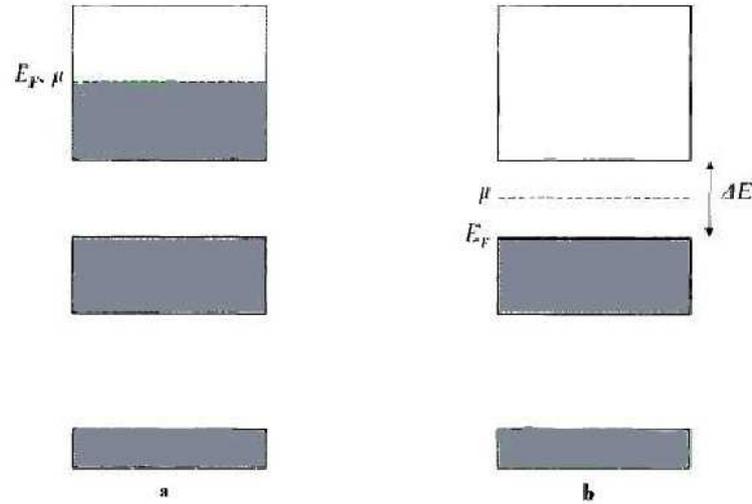


Figura 1.4: Bandas de energia para um condutor(a) e um isolante(b) retirados da ref.[13].

uma constante de acoplamento. Se k pertence a primeira zona de Brillouin $-\frac{\pi}{l} \leq k < +\frac{\pi}{l}$, temos o gráfico Fig.1.3, que mostra que nem toda energia é permitida.

Os estados permitidos podem estar ocupados por elétrons ou não. No estado fundamental todos os níveis de energia abaixo de uma certa energia E_f , estão ocupados. A energia do nível preenchido mais elevado do estado fundamental é a energia de Fermi E_f . Discussão sobre energia de Fermi, estado fundamental, zona de Brillouin e etc, pode ser encontrada na referência ref.[12] ou em livros de estado sólido.

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

A Fig1.4 mostra um esquema das bandas de energia para materiais condutores a) e isolantes b). Uma mudança na temperatura ou pressão pode acarretar numa mudança

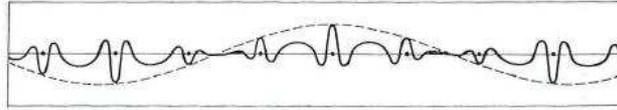


Figura 1.5: Padrão típico de uma função de onda para um elétron de Bloch.

na estrutura de bandas ocasionando uma transição metal-isolante. Para ambos os casos as funções de onda do sistema são as funções de onda de Bloch, que se estendem por todo o sistema como consequência da periodicidade do potencial cristalino. A figura Fig1.5 mostra um esquema para uma função de onda de Bloch típica.

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

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

1.2.2 Transição de Mott

A transição de Mott [14, 15, 16] acontece quando há uma interação elétron-elétron, onde uma configuração de estados é energeticamente mais favorecida que outra. Neste tipo de transição é considerado um fenômeno real, que acontece devido a interação dos elétrons com outros elétrons, tendo seus movimentos correlacionados. E essas correlações são responsáveis pela transição de Mott. Para compreender melhor o mecanismo que rege a transição de Mott, podemos fazer a conjectura que segue. Vamos considerar um sistema com N átomos, com um único elétron de condução por átomo. A energia média de um elétron localizado sobre um único orbital é a energia de ligação entre o orbital e o elétron que será escolhida como sendo igual a zero. No caso cristalino estes N elétrons vão dar origem a uma banda de largura B , que pode ser visualizada na figura Fig.1.6. Como a banda vai de $-B/2$ a $B/2$ a energia média de um elétron de valência é aproximadamente $-B/4$ ref.[17]. Esta redução da energia é responsável pela coesão metálica. No entanto, em um sistema metálico os elétrons têm grande mobilidade e podem ocupar quaisquer

um dos orbitais do sistema, criando a possibilidade de ocupações duplas.

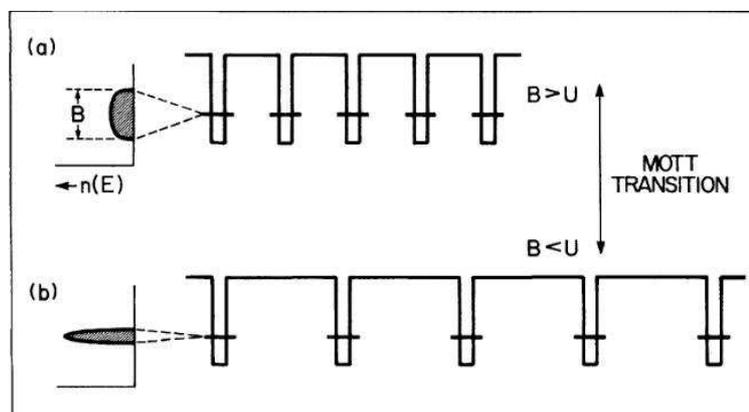


Figura 1.6: Esquema para a transição de Mott, retirada da referência[17]. Quando a largura da banda B diminui, com o aumento da distância entre os elétrons, o elétron perde mobilidade. Neste caso o custo energético para que dois elétrons ocupem o mesmo orbital, neste caso U , é maior que a largura da banda. Neste caso o elétron movimentando-se não é uma configuração energeticamente favorecida e o material torna-se isolante.

A energia $U = \langle e^2/r_{12} \rangle$ é o custo de energia para que dois elétrons ocupem um mesmo orbital atômico. Como numa fase metálica o elétron é livre para percorrer a rede e podemos ter orbitais vazios, com um elétron ou dois elétrons, com probabilidades $1/4, 1/2$ e $1/4$ respectivamente. Se a energia de interação elétron-elétron é menor que a largura da banda, esta configuração é energeticamente favorecida e os elétrons ficam deslocalizados, o material é condutor. Se por outro lado esse custo energético para que dois elétrons ocupem o mesmo orbital for maior que a largura da banda, não será mais vantajoso para sistema continuar com os elétrons possuindo tal mobilidade para percorrer toda a rede, ficando então localizados, o material é agora isolante. Essa transição é dita induzida por correlação elétron-elétron. A transição metal-isolante induzida por interação elétron-elétron consiste de uma competição entre abaixamento médio da energia $B/4$ ocasionado pela deslocalização e o custo de correlação é $U/4$ devido às duplas ocupações. Se $-B/4 + U/4$ for maior que a energia média de um elétron localizado, a deslocalização é uma configuração energeticamente desfavorável. Desta conjectura podemos deduzir que a condição de localização induzida por interação elétron-elétron é dada aproximadamente

por:

$$U > B \quad (1.11)$$

Se esta desigualdade for satisfeita, os elétrons estão localizados. Assim como a transição metal isolante de Bloch, a transição de Mott é uma transição localização-deslocalização para estados eletrônicos. A transição é indicada na figura Fig1.6, quando da passagem de $a \leftrightarrow b$, que ocorre quando uma separação interatômica causa uma mudança significativa nas duas energias características dos elétrons de valência do sistema: a largura da banda B e a energia de correlação elétron-elétron U . Uma melhor discussão pode ser ainda encontrada na referência [17]

1.2.3 Transição de Anderson

No contexto de transições metal isolante, já discutimos uma transição em sistemas cristalinos conhecida como transição de Bloch, e uma transição induzida por correlações entre elétrons, a transição de Mott. Agora vamos mostrar uma transição induzida por desordem, essa transição ficou conhecida como transição de Anderson. Quando se pensa em física do estado sólido, não se pode pensar apenas em estruturas cristalinas. A maioria dos sólidos encontrados na natureza ou produzidos em laboratório possui algum tipo de desordem, sendo chamados de materiais amorfos. O estudo da desordem desempenha um papel de grande importância no entendimento das propriedades de transporte eletrônico, uma vez que modelos que contemplam esse ingrediente se constitui em um modelo mais realístico e por sua vez possui maior aplicabilidade.

As mudanças decorrentes da introdução da desordem num sistema contendo elétrons livres, podem ser discutidas de forma qualitativa. As funções de onda para elétrons livres são funções estendidas por todo o espaço. Quando um potencial é introduzido, esta onda encontra uma barreira. Logo, parte da onda é transmitida e parte da onda é refletida na mesma. Se colocarmos mais barreiras, a onda será refletida várias vezes e o sistema agora terá ondas incidentes e ondas refletidas que podem interferir. Estas interferências podem mudar bastante a forma da função de onda no sistema, sobretudo se tivermos potenciais aleatórios, a função de onda não manterá a coerência de fase após as reflexões. Esses potenciais aleatórios podem ser gerados a partir de barreiras colocadas em lugares aleatórios da rede ou por barreiras que tenham intensidades aleatórias.

Se a desordem for fraca a função de onda continua estendida por todo o sistema,

mas perde a coerência de fase depois de muitas reflexões. Se o grau de desordem é forte, a função de onda fica concentrada em uma pequena região do sistema, e é praticamente nula em outros lugares. Para grandes distâncias a função de onda tem um decaimento exponencial[18].

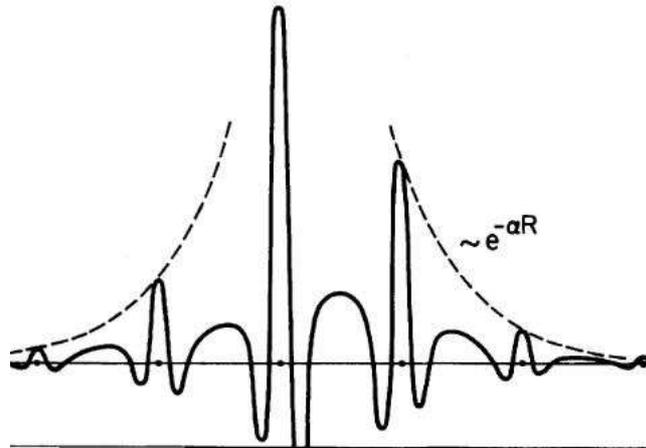


Figura 1.7: Localização exponencial da função de onda sob a influência de um potencial aleatório, retirada da referência[17].

Na figura 1.7 podemos ver a localização exponencial da função de onda, que fica restrita a poucos átomos da rede.

Para desordens intermediárias pode haver uma transição metal-isolante, que vai depender da localização da energia de Fermi como já discutimos.

No esquema da Fig.1.8 mostramos o mecanismo da transição de Anderson. Os poços de potencial são sítios atômicos com a mesma separação espacial, cuja intensidade varia aleatoriamente mas dentro de uma largura W na parte b da Fig.1.8. Também é mostrado o caso sem desordem, onde B é a largura da banda dos estados permitidos, o que pode ser visto na parte a da Fig.1.8.

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

$$W > B. \quad (1.12)$$

A probabilidade então de encontrarmos um elétron a uma distância R do centro da

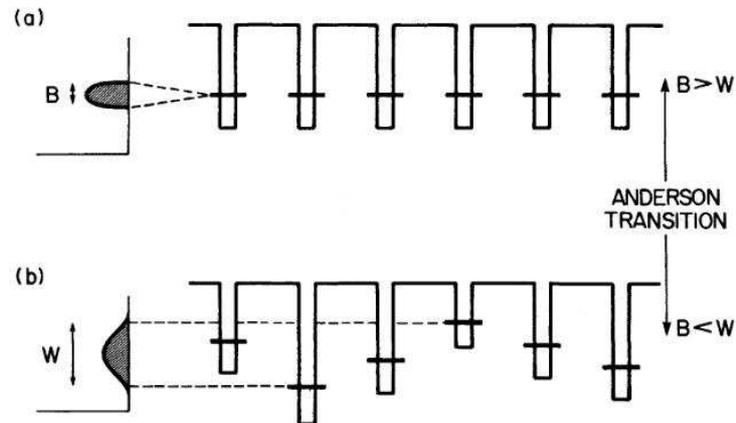


Figura 1.8: Esquema para a transição de Anderson, retirada da referência[17].

função de onda decai exponencialmente $\psi(R) \propto e^{-\alpha R}$. A quantidade α , é um parâmetro importante que pode caracterizar um estado eletrônico quanto a localização, conhecido como inverso do comprimento de localização. O inverso do comprimento de localização é indicado na figura Fig1.7.

A transição metal isolante portanto pode ser originada de alguns fatores tais como, desordem e interação eletrônica. Podemos ainda discutir mais sobre localização devido a desordem se fizermos uma analogia clássica, e dessa forma entender melhor o mecanismo de localização devido a desordem, e como se faz para medir o grau de localização.

Pode-se compreender porque a função de onda de um elétron na presença de um potencial desordenado é susceptível a localização. Consideremos, portanto, uma partícula se movendo sob a influência de um potencial $V(x)$ Fig.1.9. Se a energia da partícula puder variar até E_0 , podemos ter estados estendidos e localizados, se a energia for maior que E_0 , a partícula está livre para se mover por todo o sistema.

Segundo o ponto de vista quântico, o fenômeno do tunelamento pode levar a uma completa deslocalização em regiões que classicamente seriam de estados localizados. De forma antagônica flutuações podem ocasionar interferências produzindo uma localização em regiões onde teríamos estados deslocalizados numa visão clássica. Exemplos de localização por interferência é a localização já mencionada, quando ondas refletidas em barreiras de potencial interferem destrutivamente. Um exemplo de deslocalização por tunelamento é o que acontece com as funções de onda de Bloch, também já discutidas.

Um conceito importante foi introduzido por Mott em 1968, para a explicação de

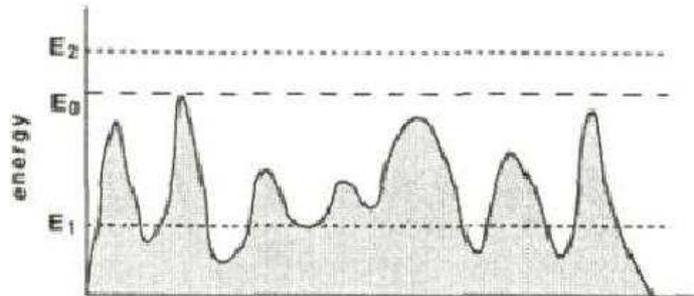


Figura 1.9: Analogia clássica, retirada da ref.[18].

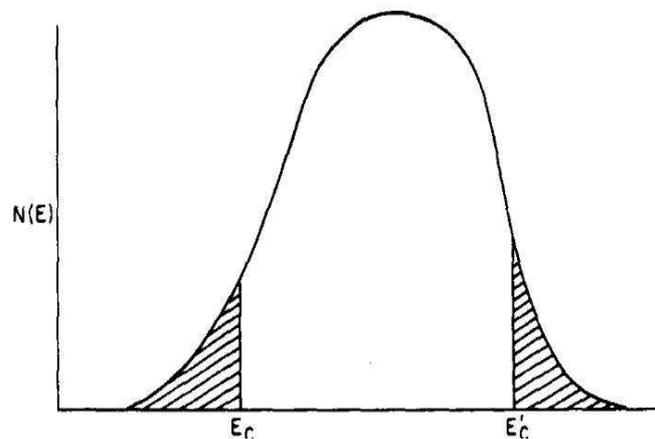


Figura 1.10: Esquema da *mobility edges*, retirado da referência[16]

uma região de energia que separa estados localizados de estados estendidos, as chamadas *mobility edges*. A Fig.1.10, mostra um gráfico da densidade de estados em função da energia. Vemos que para valores entre E_c e E'_c a densidade de estados é alta em relação a energias fora do espaço delimitado por E_c e E'_c . Em geral a posição de tal região de energia, que separa estados estendidos de localizados, depende do grau da desordem. Se a desordem for alta ela irá para o centro da banda e o material será um isolante.

Podemos ainda considerar um outro exemplo clássico que exemplifica muito bem o fenômeno da localização. Considere a Fig.1.11 nela mostramos três regiões distintas. Supondo que as partes escuras sejam superfícies sólidas e as partes claras água. Essa situação seria semelhante ao caso quântico se considerarmos que as partes de terra firme

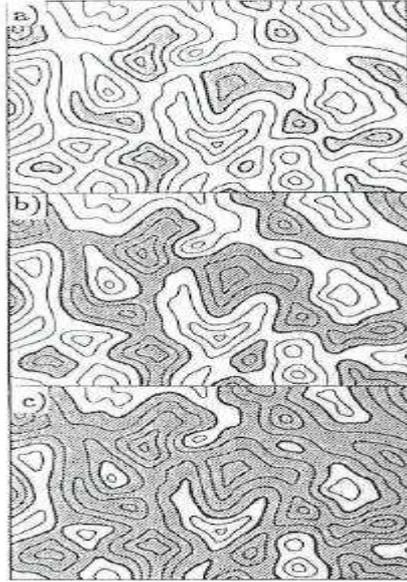


Figura 1.11: a)desordem fraca b)nível intermediário de desordem c) desordem forte

correspondem a regiões com potencial $V(r)$ e, as regiões que correspondem a água, regiões com energia E . Na Fig.1.11a temos muitas regiões claras de forma que as regiões de terra firme não cercam nenhuma delas. Aqui $E > V(r)$ e teríamos um oceano. Já na figura Fig.1.11c temos várias regiões de água completamente cercada por terra firme, aqui $E < V(r)$ e teríamos um lago. Assim de forma análoga teríamos uma transição oceano-lagos, ocorre uma transição estados deslocalizados-localizados. Um navio só teria possibilidade de percorrer o sistema para o caso da Fig.1.11a, de outro modo ficaria preso. Do ponto de vista quântico, um elétron teria dificuldades para se movimentar sob a influência de um potencial irregular.

Podemos ver agora, como proceder para medir o grau de localização da função de onda eletrônica. A função de onda localizada em meios com potenciais aleatórios possui um comportamento assintótico descrito por um decaimento exponencial da função de onda, segundo um *comprimento de localização* $\lambda = 1/\alpha$, ou seja $\psi(r) \sim e^{-\alpha r}$. O termo α mede a largura típica da função de onda, e $\alpha \rightarrow 0$ corresponde a um estado estendido. Outro critério usado no estudo da localização é o inverso do número de participação, ou

segundo momento da densidade de probabilidade [19]:

$$P^{-1} = \sum_r |\psi(r)|^4. \quad (1.13)$$

Esta grandeza mede a porção do sistema onde a função de onda difere marcadamente de zero. Para estados estendidos temos $P \sim N$ com N sendo o número de sítios da rede, a medida que o tamanho da rede cresce P aumenta. Para estados localizados $P \sim N_0$, com $N_0/N \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$. Portanto a função de participação reescalada pelo número de sítios da rede (P/N) é uma medida suficientemente precisa para se detectar estados localizados ($P/N \rightarrow 0$) ou estendidos ($P/N \rightarrow \text{constante}$) no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Outras medidas utilizadas para se obter a natureza localizada ou entendida de um estado eletrônico são o inverso do comprimento de localização (ou expoente Lyapunov) e a condutância [18]. O fenômeno da localização em sistemas desordenados está agora bem delineado. Mostraremos em seguida o modelo que é protótipo para estudar sistemas desordenados ou materiais amorfos, o modelo de Anderson.

1.3 O modelo de Anderson

Como já discutido, a desordem nos materiais pode ter muitas origens. De acordo com essa origem um modelo é usado de forma a simular o comportamento do sólido. Um modelo para uma desordem estrutural tal qual acontece em materiais amorfos pode ser dada pelo Hamiltoniano:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{j=1}^N V_j(r - R_j). \quad (1.14)$$

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

O modelo de Anderson [1, 18, 17], considera somente elementos essenciais para o estudo da natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. O Hamiltoniano contém um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos na

presença de um potencial aleatório. A idéia geral é estudar vários fenômenos em materiais cujas propriedades de transporte são influenciadas pela desordem. Na representação de Wannier *tight binding*, o Hamiltoniano de Anderson pode ser escrito como:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j|. \quad (1.15)$$

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

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

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (1.16)$$

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

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=1}^{j=z} c_{i+j}. \quad (1.17)$$

Para o caso puro todas as energias ϵ seriam iguais (podendo ser inclusive zero). Neste caso ficaríamos com:

$$Ec_i = t(c_{i+1} + c_{i-1}) \quad (1.18)$$

Escolhendo $c_n = c_0 e^{ink}$, a equação 1.18 fornece que $E = 2t \cos(k)$. Isto é termos

uma banda de energia $(-2t < E < 2t)$ de largura $B = 4t$ exatamente como discutido para o caso da Fig. 1.2. O modelo portanto abrange o caso puro e com desordem. Se o estado ψ é não estacionário, os coeficientes c_i obedecem a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{dc_i}{dt} = E_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (1.19)$$

Se em um instante $t = 0$ em um determinado sítio n tivermos $|c_n|^2 = 1$, ou seja o elétron foi colocado no sítio n , com $|c_{i \neq n}|^2 = 0$. Podemos ver a evolução temporal através da equação 1.19. Depois de um certo tempo se tivermos ainda $|c_n|^2 = 1$, o estado está localizado. Se por outro lado depois de um certo tempo tivermos $|c_n|^2 = 0$, certamente o elétron se difundiu na rede e temos um estado estendido no sistema.

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

$$\Psi = |i\rangle + \sum_{j \neq i} c_{ij} |j\rangle. \quad (1.20)$$

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

1.3.1 Teoria de Escala para a Transição de Anderson

Anderson e outros autores apresentaram uma teoria de escala [21] para a transição metal-isolante. Nessa teoria, há uma previsão para que haja transição metal isolante dependendo da dimensão do sistema. O que apresentaremos agora, é a teoria de escala na reformulação de Toulles [22].

No tratamento de Toulles a unidade básica não é mais apenas um sítio atômico i mas sim uma caixa de aresta L e volume L^d que contém muitos sítios. O sólido é formado por várias caixas acopladas e as energias características do modelo de Anderson W e B são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os sítios ΔE e no deslocamento

δE causado por mudanças nas condições de contorno. Nesta nova abordagem temos uma grandeza chamada condutância generalizada g , e é dada por :

$$\frac{\Delta E}{\delta E} \approx \frac{1}{g}. \quad (1.21)$$

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

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D}, \quad (1.22)$$

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

$$t_D = \frac{L^2}{D}. \quad (1.23)$$

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

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.24)$$

e combinando as Eq.1.22,1.23 e 1.24 temos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (1.25)$$

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

$$n(E) = 1/(L^d \Delta E). \quad (1.26)$$

A condutância desempenha o papel de medir a intensidade da desordem semelhantemente a razão W/B no modelo de Anderson tradicional. Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados que estão localizados, não são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ($\delta E < \Delta E$).

O parâmetro de desordem, g^{-1} é definido por

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.27)$$

Substituindo as Eq.1.25 e 1.26 na Eq.1.27 podemos observar a dimensionalidade e a dependência de escala que o parâmetro g apresenta

$$g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2}. \quad (1.28)$$

Se a Eq.1.25 é válida no limite macroscópico, a equação Eq.1.28 é válida para estados estendidos no mesmo limite. A função $g(L)$ é a condutância generalizada expressa em unidades de e^2/\hbar , $L^{d-2}\sigma$ é a condutância de um cubo de dimensão d e aresta L . Na teoria de escala o comportamento da função $g(L)$ depende do comprimento de escala utilizado. Por exemplo, suponha que em uma dada circunstância a condutância depende de L_0 , um novo valor de $g(L)$ pode ser encontrado apenas pelo seu valor inicial $g(L_0)$ e por um fator de escala b , onde $L = L_0b$.

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

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (1.29)$$

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

Se tivermos que $\beta > 0$ a condutância aumenta com o tamanho da amostra, temos assim um comportamento metálico. A região de comportamento metálico é caracterizada por ter um comportamento clássico[18], isto é:

$$\beta(g) = d - 2, \quad (1.30)$$

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

$$\beta(g) = \ln g, \quad (1.31)$$

(no limite $g \rightarrow 0$). Para g pequeno, com uma forte desordem, os estados são exponencialmente localizados. A amplitude da função de onda de um elétron localizado numa caixa

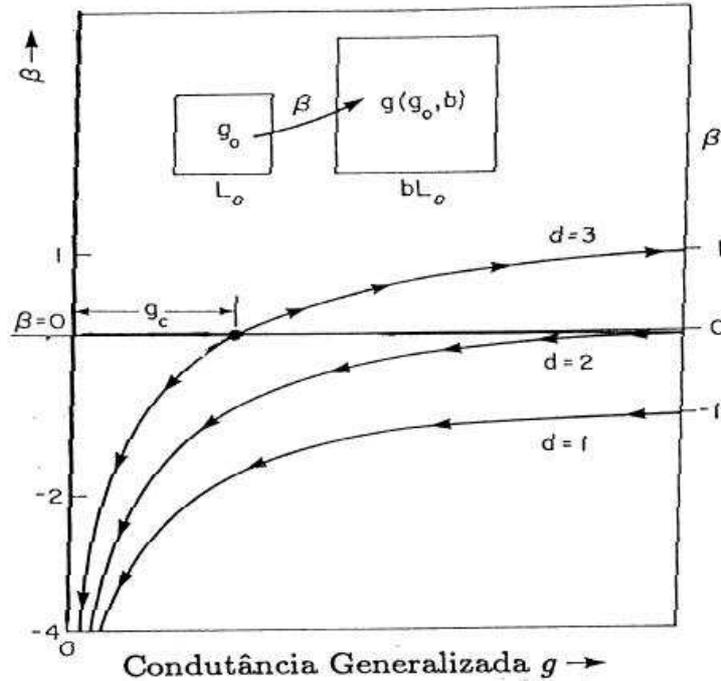


Figura 1.12: Comportamento da condutância generalizada de $\beta(g)$, retirada da referência [17]

de aresta L é da ordem de $e^{-\gamma L}$, onde γ é o expoente Lyapunov. Na figura Fig.1.12 podemos ver o comportamento de $\beta(g)$. Um resultado notável é que em uma e duas dimensões não há a previsão para transição. Muitos experimentos reais têm tido boas concordâncias com os resultados numéricos.

Uma quantidade importante para caracterizar a transição de Anderson é o expoente crítico ν que descreve a divergência do comprimento de localização λ ,

$$\lambda \propto |E - E_c|^{-\nu}. \quad (1.32)$$

A estimativa teórica de ν pode ser comparada com a medida experimental do expoente da condutividade μ

$$\sigma(T=0) \propto (E - E_c)^{-\mu}, \quad (1.33)$$

através da relação de Wigner, $\mu = (d - 2)\nu$, onde d é a dimensionalidade do sistema e $\sigma(T = 0)$ é condutividade a temperatura zero. Em três dimensões teremos claramente $\mu = \nu$.

A simetria do Hamiltoniano também influencia nos fenômenos críticos. Para a transição de Anderson com elétrons não interagentes as simetrias importantes são simetria de tempo reverso (STR) e simetria de rotação de spins (SRS). Estudos têm determinado o valor de ν com precisão em cada classe de universalidade (ortogonal, unitária e simplética) que são agrupadas de acordo com as simetrias do Hamiltoniano. Se o sistema possui tanto STR quanto SRS a classe é dita como *ortogonal*. Se a STR é quebrada conservando a SRS a classe é dita como *unitária*. E por fim, se tivermos um sistema com STR mas com uma quebra da SRS por uma interação spin-órbita a classe é dita *simplética* [23, 24].

A obtenção numérica do expoente ν para diferentes sistemas ajuda no estudo das propriedades eletrônicas e classificam os mesmos. Para a classe ortogonal têm-se encontrado $\nu = 1.57 \pm 0.02$ [25], para a classe unitária $\nu = 1.43 \pm 0.04$ [23] ambos em três dimensões. Para a classe simplética foi encontrado $\nu = 2.746 \pm 0.009$. A classe simplética tem sido de grande interesse depois da descoberta da transição metal-isolante em sistemas Si-MOS [26].

Existem muitos experimentos na literatura onde a transição metal-isolante vem sendo observada. Como bons exemplos podemos citar os experimentos realizados em silício dopado com fósforo e bário [18, 27]. Nestes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. A força ou a largura da desordem pode ser modificada variando a concentração de dopantes ou através de um campo. Durante muitos anos foi sugerido a existência de dois tipos de materiais: os não compensados com $\nu = 0.5$ e semicondutores compensados e materiais amorfos com $\nu = 1$. Recentemente foi observado um expoente $\nu = 1$ para o silício dopado com fósforo não compensado ($Si : P$) [28]. Portanto não só a classificação do tipo de material como também o valor do expoente são questões abertas. O que tem se observado na literatura atual, é que a teoria de escala pode ser violada. Isso acontece sobretudo quando a desordem contemplada pelo modelo de Anderson é gerada de forma correlacionada. A violação da teoria de escala é o tema da próxima subseção.

1.3.2 Violação da Teoria de Escala

Nesta seção vamos apresentar alguns trabalhos recentes que mostram que a teoria de escala pode ser violada. Vamos separar em duas classes: sistemas aperiódicos e sistemas

com desordem correlacionada. De uma forma geral, esses sistemas apresentam estados estendidos mesmo em baixa dimensionalidade. O novo ingrediente responsável por esta violação da teoria de escala é um potencial *on site* distinto do potencial completamente aleatório que foi utilizado até agora no modelo de Anderson.

Modelo aperiódico

Na década de oitenta, Sarma[29] estudou um modelo aperiódico unidimensional no qual a natureza dos auto-estados estendidos e localizados era função de dois parâmetros λ e ν . Neste modelo, Sarma considerou uma forma de potencial para o qual o sistema seria um intermediário entre o modelo aleatório de Anderson e o modelo periódico de Bloch. Alguns trabalhos nesta linha podem ser encontrados nas referências [30, 31, 32]. No trabalho de Sarma o potencial era do tipo $\epsilon_n = \lambda \cos(\pi \alpha n^\nu)$ onde λ , α e ν são números positivos. Para α racional e ν inteiro o modelo retorna ao modelo periódico de Bloch, para α irracional e $\nu \geq 2$ o modelo de *tight binding* pseudo aleatório torna-se igual ao modelo de Anderson aleatório com todos os estados localizados. Para α irracional e $\nu = 1$ temos um problema de potencial incomensurável, o qual pode ter estados estendidos e localizados. Para $0 < \nu < 1$ e $\lambda < 2$ temos estados estendidos para energias E , tais que $|E| < 2 - \lambda$ e estados localizados para $2 + \lambda > |E| > 2 - \lambda$. Para $\nu = 1$ todos os estados são localizados se $\lambda > 2$ e todos são estendidos se $\lambda < 2$.

Modelos com desordem correlacionada

Um dos primeiros modelos unidimensionais com estados estendidos induzidos por correlações locais na desordem foi o "modelo de dímeros aleatórios"[33]. O modelo consiste de uma liga binária na qual as energias dos sítios do sistema ϵ_a e ϵ_b eram distribuídas com probabilidades respectivamente de q e $1 - q$ e ϵ_b sempre aparece em pares. Foi mostrado neste trabalho que, se $|\epsilon_a - \epsilon_b| \leq 2t$, onde t é a amplitude de hopping, o sistema apresenta um estado estendido de energia $E = \epsilon_b$. Estes tipos de modelos em uma dimensão podem servir para explicar o comportamento de materiais condutores como a polianilina[34].

No final da década de noventa, Moura e Lyra [20] mostraram que correlações de longo alcance podem estabilizar uma fase de estados estendidos em torno do centro da banda. Este trabalho mostrou pela primeira vez uma verdadeira fase metálica em sistemas unidimensionais desordenados. O modelo de Moura e Lyra consiste de um Hamil-

toniano *tight binding* onde as energias foram distribuídas nos sítios conforme o traço de um movimento Browniano fracionário. O traço de um movimento Browniano fracionário basicamente é uma seqüência de números cujo o espectro de potência tem um comportamento tipo lei de potência ($S(k) \propto 1/k^\alpha$). O expoente α mede o grau de correlação da seqüência. Para $\alpha = 0$ recupera-se um ruído branco completamente descorrelacionado enquanto que em $\alpha > 0$, temos uma seqüência de números com funções de auto correlação de longo alcance. Na natureza, vários processos estocásticos geram seqüências aleatórias com correlações de longo alcance[35], daí a grande importância desta fenomenologia. De fato esta previsão teórica de estados estendidos em baixa dimensionalidade, induzidos por correlação de longo alcance tem motivado uma série de estudos teóricos/experimentais dentro deste contexto.

Um dos primeiros trabalhos que trazia uma generalização da quebra da teoria de escala para o caso bidimensional, com correlações de longo alcance na distribuição da desordem, foi o trabalho de Xiong [36]. Os autores deste trabalho consideraram o sistema num plano $x - y$, numa geometria quase unidimensional. O sistema era como uma longa faixa onde a direção y era muito maior que a direção x . O estudo de sistemas quase unidimensionais foi de grande interesse nos anos oitenta pois possibilitaram o cálculo do comprimento de localização dos auto estados e uma extrapolação para uma geometria verdadeiramente de duas dimensões. Esta extrapolação é feita através de uma análise de tamanhos finitos.

As correlações de longo alcance, para este modelo, foram introduzidas na direção maior, através da seguinte superposição, que considera que as energias aleatórias dos sítios consistem de duas partes:

$$\epsilon_{im} = \eta_m + \nu_{im}, \quad (1.34)$$

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

Para calcular o comprimento de localização Xiong e colaboradores, usaram o método da matriz de transferência bidimensional. Neste trabalho foi encontrada uma transição metal-isolante do tipo Kosterlitz-Thouless[36]. Uma característica deste tipo de transição, é que o comprimento de localização λ diverge exponencialmente numa forma $\lambda_\infty \propto \exp(\theta_0/\sqrt{E - E_c})$. A distribuição da desordem tem densidade espectral tipo lei de potencia $S(k) \propto 1/k^\alpha$, k é o vetor de onda na direção y .

A referência [37] traz um estudo do modelo de Anderson numa rede bidimen-

sional, na qual as correlações são introduzidas nas duas direções x e y . Para introduzir as correlações de longo alcance neste sistema foi aplicado um método de transformada de Fourier em duas dimensões para construir uma seqüência de energias de densidade espectral $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2d}}$, onde $k = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$. Este trabalho traz um estudo estático e dinâmico do modelo de Anderson. Na parte estática os autores usaram o método de diagonalização exata para investigar a função de participação (grandeza que dá uma medida de quantos sítios participam da função de onda). O estudo da participação reportou a existência de estados estendidos no regime de baixas energias para $\alpha_{2d} > 2$. Já no caso dinâmico os autores usaram o método de Runge-Kutta para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo para um pacote de onda inicialmente localizado. Na parte dinâmica uma análise do desvio médio quadrático σ , mostrou que o sistema apresenta regimes diferentes de acordo com o parâmetro α_{2d} . Para correlações fracas ($\alpha_{2d} < 2$) um comportamento difusivo foi encontrado com $\sigma^2 \propto t$. Já para correlações fortes ($\alpha_{2d} > 2$) o sistema apresenta uma dinâmica balística com $\sigma^2 \propto t^2$. Já na referência[38], entre outros resultados foi encontrado, usando a mesma distribuição correlacionada com espectro na forma de lei de potência, um diagrama de fases de estados estendidos, localizados e mais uma região de estados conjecturados como críticos.

A referência[39] traz um estudo experimental sobre localização. Essa observação experimental trata da transmissão de micro-ondas em guias retangulares em espalhadores correlacionados. O aparato experimental pode ser visto na Fig.1.13. Os espalhadores colocados no guia de ondas são parafusos micrométricos cujo as dimensões são correlacionadas. Foi observado uma influencia da transmissão. Quando a profundidade com a qual os parafusos eram fincados, era feita de forma completamente aleatória, ocorria localização das micro-ondas. Se por outro lado, a profundidade na qual os parafusos eram fincados, obedecia a alguma regra de correlação, era observado transmissão das micro-ondas.

Outro experimento no qual se tem observado a transição de Anderson é em cristais fotônicos como pode ser visto em [40]. Neste trabalho podemos ver uma rede fotônica bidimensional. No plano $x - y$ uma variação periódica no índice refrativo é produzido por um padrão de interferência de três ondas planas, resultando em uma rede ordenada, que pode ser vista no topo esquerdo da Fig.1.14. Um feixe se propaga pela amostra na direção z onde o índice refrativo é uniforme. Desordem é introduzida através de flutuações no índice refrativo. A imagem na saída é então registrada, e aparecem à direita na figura. A largura do feixe de saída é plotada em cima da imagem (com uma linha) com o logaritmo

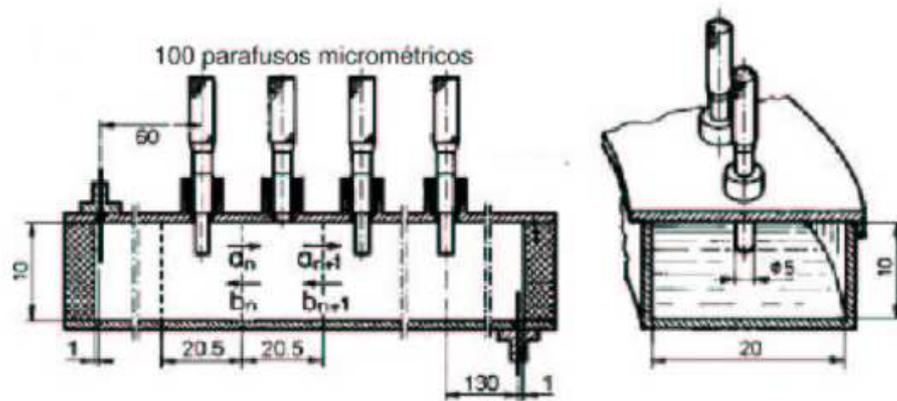


Figura 1.13: Aparato experimental, que demonstra uma localização induzida por desordem correlacionada

de intensidade versus a distância do centro do feixe. Para a rede desordenada há um decaimento exponencial da intensidade observada na saída, o que é uma assinatura da transição de Anderson.

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

O capítulo seguinte é dedicado ao estudo da dinâmica de um pacote de onda sob a influência de uma interação não linear e não instantânea, a não linearidade tem como fonte um acoplamento elétron-fônon. Tal estudo apresentou resultados novos muito interessantes.

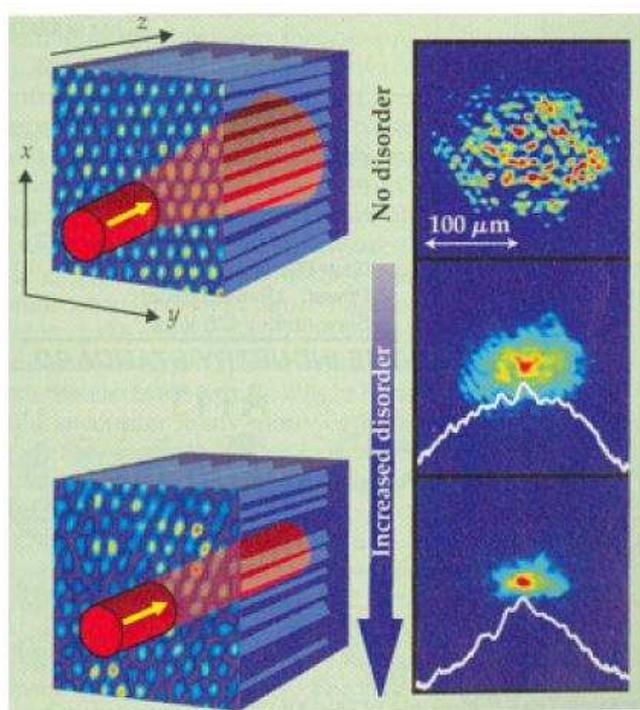


Figura 1.14: Experimento que evidencia uma transição de Anderson

Capítulo 2

Espalhamento eletrônico através da interação elétron-fônon com atraso

2.1 Introdução

O problema de um elétron se propagando em uma rede é a rigor, um problema de muitos corpos. Este tipo de problema, tem despertado o interesse de estudiosos há muito tempo, afinal a natureza está repleta de sistemas de muitos corpos e, o estudo de suas propriedades necessita ser abordado como um todo e não individualmente. O problema de muitos corpos possui dois ingredientes básicos. Primeiro o sistema tem que ter muitas partículas, muitos elétrons, muitos átomos, muitas moléculas. Segundo, essas partículas devem estar sujeitas a algum tipo de interação, pois se não houver interação, o problema poderia ser resolvido individualmente para cada partículas o que seria na verdade não um problema de muitos corpos mais muitos problemas de um corpo. Então quando estudamos sistema de muitos corpos, estamos interessados em estudar como a interação entre estes corpos afeta o comportamento do sistema. Sistemas como elétrons em um átomo ou metal interagindo por forças de Coulomb, elétrons em um metal, átomos em um sólido, todos são exemplos de sistemas com muitas partículas que possuem algum tipo de interação. A solução deste tipo de problema é extremamente complicada. Uma noção das dificuldades em se trabalhar com este tipo de problema pode ser dada ao se pensar em um gás, com um número de partículas muito grande que interagem. Então, supondo que a trajetória de cada partícula possa ser alterada pela interação com as outras, o resultado é uma trajetória

complexa para cada partícula. Em contraste, o caso em que as partículas não interagem, produz um movimento livre de interferência, e a trajetória de cada partícula pode ser analisada individualmente. Devido a complexidade do problema de muitas partículas, não é raro encontrar casos em que simplesmente a interação é ignorada, estudando-se o sistema como se não houvesse interação. Surpreendentemente em alguns casos, negligenciar a interação produz bons resultados, como é o caso da abordagem feita ao gás ideal. No entanto isso nem sempre é interessante para o sistema em questão. O estudo de sistemas interagentes se faz necessário.

Para nosso problema, a interação elétron-fônon aparece como um termo não-linear na equação de Schrödinger que descreve a dinâmica do sistema, dando origem a chamada Equação não-linear de Schrödinger (ENLS) em sua forma discreta. Mostraremos a partir de agora alguns sistemas não-lineares que obedecem a mesma equação não-linear.

2.1.1 Sistemas não Lineares

A (ENLS) pode servir para descrever o movimento de ondas em guias de ondas não-lineares acopladas. O sistema é mostrado na figura Fig.2.1. Quando a onda eletromagnética atravessa o guia de onda não linear, $a_\mu^{(n)}$ representa o μ -ésimo modo do n -ésimo guia que satisfaz a seguinte equação [41]:

$$-i \frac{da_\mu^{(n)}}{dz} = \frac{\omega}{4P_\mu} \int dx dy \mathbf{E}_\mu^{(n)} \cdot \mathbf{P}', \quad (2.1)$$

onde o eixo do guia de onda é na direção z , o termo $\mathbf{E}_\mu^{(n)}$ representa o campo elétrico do μ -ésimo modo no n -ésimo guia P_μ é a potência no μ -ésimo modo e \mathbf{P}' é a polarização devido ao efeito não linear. O n -ésimo guia tem polarização dada por :

$$\mathbf{P}'/\epsilon_0 = \mathbf{E}^{(n)}\delta + (\delta + \epsilon) [\mathbf{E}^{(n+1)} + \mathbf{E}^{(n-1)}] + \chi^{(3)} [|\mathbf{E}^{(n)}|^2 + |\mathbf{E}^{(n-1)}|^2 + |\mathbf{E}^{(n+1)}|^2] \quad (2.2)$$

Na equação ϵ e $\delta + \epsilon$ representam as constantes dielétricas, respectivamente do material hospedeiro e do material da guia de onda. O termo $\mathbf{E}^{(i)}$ representa a contribuição total do i -ésimo guia e χ a susceptibilidade [42]. Substituindo a equação 2.2 em 2.1, teremos:

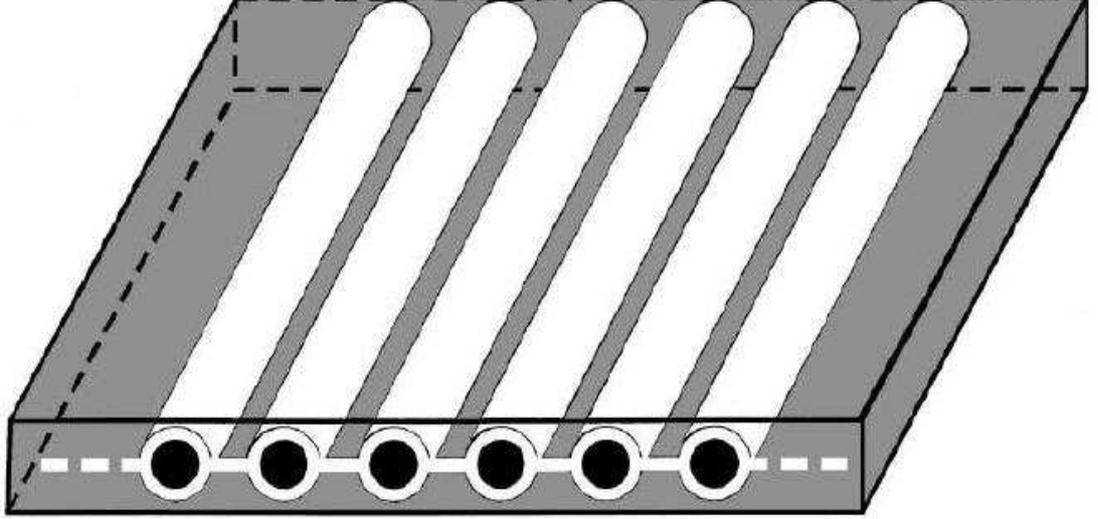


Figura 2.1: Sistema de guia de onda não-linear acopladas, retirado da Ref.[43]

$$-i \frac{da_{\mu}^{(n)}}{dz} = \frac{\omega \epsilon_0}{4P_{\mu}} \int dxdy [\delta(\mathbf{E}_{\mu}^{(n)})^* \cdot \mathbf{E}^{(n)} (\epsilon + \delta)(\mathbf{E}_{\mu}^{(n)})^* \cdot (\mathbf{E}^{(n-1)} + \mathbf{E}^{(n+1)}) + \chi(|\mathbf{E}^{(n)}|^2 + |\mathbf{E}^{(n-1)}|^2 + |\mathbf{E}^{(n+1)}|^2)(\mathbf{E}_{\mu}^{(n)})^* \cdot \mathbf{E}^{(n)}] \quad (2.3)$$

Se admitirmos que estamos trabalhando com os modos mais baixos em cada guia, tal que $\mathbf{E}^{(n)} = a_1^{(n)} \mathbf{E}_1^{(n)}$, então a equação Eq.2.3 torna-se:

$$-i \frac{da_{\mu}^{(n)}}{dz} = Q_1^{(n)} a_1^{(n)} + Q_{n,n-1}^{(n)} a_1^{(n-1)} + Q_{n,n+1}^{(n)} a_1^{(n+1)} + Q_3^{(n)} |a_1^{(n)}|^2 a_1^{(n)}, \quad (2.4)$$

com coeficientes:

$$Q_1^{(n)} = \frac{\omega \epsilon_0}{4P_1} \int dxdy \delta |\mathbf{E}^{(n)}|^2, \quad (2.5)$$

$$Q_3^{(n)} = \frac{\omega \epsilon_0}{4P_1} \chi \int dxdy \delta |\mathbf{E}^{(n)}|^4, \quad (2.6)$$

$$Q_{nl} = \frac{\omega \epsilon_0}{4P_1} \int dxdy (\epsilon + \delta)(\mathbf{E}^{(n)})^* \cdot \mathbf{E}^{(l)}, \quad (n \neq l). \quad (2.7)$$

Assumindo agora que os coeficientes são uniformes para cada guia de onda tal que:

$Q_1 = Q_1^{(n)}$, $Q_{n,n-1} = Q_{n,n+1} = -V$ e $Q_3 = Q_3^{(n)}$ para qualquer n . Então a equação 2.4 ficará:

$$-i \frac{da_\mu^{(n)}}{dz} = Q_1 a_1^{(n)} - V(a^{(n-1)} + a^{(n+1)}) + Q_3 |a^{(n)}|^2 a^{(n)}. \quad (2.8)$$

Podemos escrever agora o termo $a^{(n)}$ em termos de potências e variáveis de fase, $a^{(n)} = \psi_n \sqrt{P} \exp(iQ_n z)$, onde P é a potência total de saída, podendo fazer ainda $\gamma = -Q_3 P$ e finalmente escrevermos:

$$i \frac{d\psi_n}{dz} = \gamma |\psi_n|^2 \psi_n + V(\psi_{n+1} - \psi_{n-1}), \quad (2.9)$$

que é a ENLS com a variável do tempo trocada pela coordenada z . Aqui a grandeza que se conserva é a potência. Estes guias de onda não lineares acoplados, representam uma ótima proposta para se construir sistemas ópticos aplicados. Nas redes não lineares, o efeito do auto-aprisionamento pode ser usado para se construir chaves muito rápidas com aplicações em computadores ópticos[41, 44]. Essa discussão é baseada na referência [43], onde poderá ser encontrado maiores detalhes sobre o problema.

Um outro problema em que podemos ver a não-linearidade descrita pela ENLS, é o caso do problema de N bósons interagentes confinados em um potencial externo. A discussão que segue está baseada nas referências[45, 46] e também é usado para o problema do condensado de Bose-Einstein em redes ópticas. Consideremos o hamiltoniano dado por:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{lat} + V_e \right] \psi(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \int \int d(\mathbf{r}) d(\mathbf{r}') \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (2.10)$$

Onde V_{lat} é o potencial devido às vibrações da rede, e V_e representa o potencial no sítio. Os operadores $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ e $\psi(\mathbf{r})$ são operadores bosônicos de campo que criam ou aniquilam uma partícula na posição (\mathbf{r}) . O potencial $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o termo devido a interação de duas partículas. O fator $\frac{1}{2}$ surge devido à contagem da auto-energia. O termo de interação, $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, pode ser escrito aproximadamente como um potencial delta[47]:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \times \delta((\mathbf{r}) - (\mathbf{r}')), \quad (2.11)$$

Onde a_s é o comprimento de onda espalhado e m a massa atômica. Com esta simplificação, nós podemos tirar vantagem da natureza periódica da rede, ou seja, $V_{lat}(\mathbf{r}) = V_{lat}(\mathbf{r} + \mathbf{d})$. Para uma partícula movendo-se sob um potencial V_{lat} , nós temos as funções de Bloch $\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_k(\mathbf{r})$, onde $u_k(\mathbf{r})$ preserva a periodicidade da rede. É conveniente trabalhar na base de Wannier, onde as auto-funções são localizadas em cada sítio. Nós podemos obter as funções de Wannier através da transformação da base de Bloch. Supondo que podemos expressar o operador $\psi(\mathbf{r})$, presente no Hamiltoniano Eq.2.10 em termos da base de Wannier,

$$w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

Expressando o operador de campo na base de Wannier nós teremos:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N b_i w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (2.13)$$

Nesta equação, N é o número total de sítios da rede e b_i é o operador bosônico de aniquilação que atua no sítio i da rede. Trocando o último resultado na equação Eq.2.10, chegamos a:

$$H = \sum_{i=1}^N \epsilon_i b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \gamma_i b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i - \sum_{\langle i,j \rangle} V_{i,j} b_i^\dagger b_j, \quad (2.14)$$

onde $\langle i, j \rangle$ indica a soma sobre sítios adjacentes $j = i \pm 1$, e onde:

$$\begin{aligned} \epsilon_i &= \int d\mathbf{r} V_e |w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^2 \\ \gamma_i &= 4\pi a_s \hbar^2 \int d\mathbf{r} |w(\mathbf{r})|^4 / m \\ V_{ij} &= \int w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{lat} \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Usando as relações canônicas de comutação $[b_i, b_i^\dagger] = \delta_{i,j}$, e o operador número definido

como $n_i = b_i^\dagger b_i$, chegamos finalmente em:

$$H = \sum_i \epsilon_i n_i - \frac{1}{2} \sum_i \gamma_i n_i (n_i - 1) + \sum_{\langle ij \rangle} V_{ij} b_i^\dagger b_j \quad (2.16)$$

Por simplicidade, podemos nos valer do limite em que $\gamma_i = \gamma$ e $V_{ij} = V$. Definimos também operadores reescalados, $a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} b_i^\dagger$. O operador número nesta nova reescala é escrito como: $\hat{n}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} n_i$. De posse de todas essas informações podemos reescrever a equação Eq(2.16) como:

$$\frac{H}{N} = \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i - \frac{N\gamma}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - \frac{1}{N}) + V \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j \quad (2.17)$$

Se agora tomarmos o limite clássico $N \rightarrow \infty$ podemos escrever: $a_j \mapsto c_j$ e $a_j^\dagger \mapsto c_j^*$, onde c_j e c_j^* são amplitudes complexas. Então para a equação Eq. 2.17) ficamos com:

$$\mathcal{H} = \frac{H}{N} = \sum_i \epsilon_i |c_i|^2 - \frac{N\gamma}{2} \sum_i |c_i|^4 + V \sum_{\langle ij \rangle} c_i^* c_j \quad (2.18)$$

Usando as relações canônicas $i \frac{\partial c_j}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial c_j^*}$ e $\frac{\partial c_j^*}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial c_j}$, nós podemos finalmente escrever a equação que descreve a dinâmica do sistema:

$$i\dot{c}_j = \epsilon_j c_j + V(c_{j+1} + c_{j-1}) - \chi |c_j|^2 c_j, \quad (2.19)$$

Na equação (2.19) $\chi = \gamma N$ é o parâmetro de não-linearidade e c_j é a amplitude de probabilidade associada ao sitio j , V é a integral de hopping entre os primeiros vizinhos, ϵ_j é a energia on-site.

Vamos considerar agora, a conexão da ENLS com o modelo de Holstein[48]. O Hamiltoniano para este modelo é dado por:

$$H = (K/2) \sum_n u_n^2 + (1/2)M \sum_n (du_n/dt)^2 + \sum_n \epsilon_n |n \rangle \langle n| - \quad (2.20)$$

$$-J \sum_n [|n+1 \rangle \langle n| + |n \rangle \langle n+1|] - A \sum_n u_n |n \rangle \langle n|.$$

O último termo desta equação representa o termo de acoplamento do pacote de onda com

as vibrações da rede. Este termo depende apenas do deslocamento em relação à posição de equilíbrio, u_n , em relação aos osciladores. Este Hamiltoniano descreve uma excitação se movendo em um cristal unidimensional, interagindo com as vibrações da rede, descritas como osciladores harmônicos. Na equação 2.21 ϵ representa a energia local no sítio n . O termo que contém J , representa a energia de troca entre primeiros vizinhos. Os dois primeiros termos representam a energia de vibração da rede, energia de osciladores. Se expandirmos as funções de onda dependentes do tempo como $|\Psi\rangle = \sum_p \Psi_p |p\rangle$, onde $|p\rangle$ é um estado de Wannier. Usando isto na equação de Schrödinger, e usando a condição de ortogonalidade para estados $|p\rangle$, podemos escrever:

$$id\Psi_n/dt = K/2 \sum_m u_m^2 + \epsilon_n \Psi_n - J[\Psi_{n-1} + \Psi_{n+1}] - Au_n \Psi_n. \quad (2.21)$$

Inserindo $\Psi_n \sim \exp[iEt]$, e usando a condição $\sum_p |\Psi_p|^2 = 1$ em 2.21, teremos:

$$E = (K/2) \sum_n u_n^2 + \sum_n [\epsilon_n - Au_n] |\Psi_n|^2 - J \sum_n (\Psi_{n-1} - \Psi_{n+1}) \Psi_n^*. \quad (2.22)$$

Podemos impor a condição de extremo para a energia, ou seja $dE/du_n = 0$, onde obtemos que $u_n = A|\Psi_n|^2/K$. Inserimos então este resultado na equação 2.21, e então obtemos:

$$id\Psi_n/dt = (A^2/2K) \sum_p |\Psi_p|^4 + \epsilon_n \Psi_n - J[\Psi_{n-1} - \Psi_{n+1}] - (A^2/K) |\Psi_n|^2 \Psi_n. \quad (2.23)$$

No limite não-adiabático teremos:

$$id\Psi_n/dt = \epsilon_n \Psi_n - J[\Psi_{n-1} - \Psi_{n+1}] - (A^2/K) |\Psi_n|^2 \Psi_n. \quad (2.24)$$

A quantidade $(A^2/2K) \sum_p |\Psi_p|^4$, representa a energia total de vibração, as energias podem ser medidas em relação a este valor.

Estes são bons exemplos de sistemas lineares onde a ENLS desempenha um importante.

2.2 Estudo da dinâmica eletrônica em sistema com interação elétron-fônon

2.2.1 Introdução

O estudo dos mecanismos físicos envolvidos no fenômeno de transporte, que assume lugar em sistemas não lineares é um problema fundamental na física do estado sólido. Considerando o transporte eletrônico, a não-linearidade surge da interação entre elétrons e vibrações na rede, a interação elétron-fônon[49, 50, 51, 52, 53, 54, 55]. Neste contexto, a (ENLS) descreve efetivamente a influência das vibrações na rede na dinâmica do elétron. A propriedade mais importante associada a ENLS é o fenômeno de auto-aprisionamento, o qual ocorre quando o parâmetro de não-linearidade excede um valor crítico da ordem da largura da banda[49, 50, 51]. Neste regime, um pacote de onda eletrônico inicialmente localizado não espalha continuamente através da rede. Portanto, a probabilidade de encontrar o elétron em seu sítio inicial é diferente de zero no limite de tempo longo, ou seja a função de onda fica aprisionada.

Em sistemas de baixa dimensionalidade, o efeito da não-linearidade parece estar dominante sobre o papel desempenhado pela desordem[56, 57, 58, 59]. Recentemente o espalhamento de um pacote de onda inicialmente localizado em duas cadeias não lineares com desordem foi estudada com detalhes[50]. Neste trabalho os autores observaram o auto-aprisionamento, através do estudo da probabilidade de retorno, para um parâmetro de não-linearidade $\chi = 3.5$.

Considerando a ENLS e as equações de Klein-Gordon com desordem, foi provado que o segundo momento e o número de participação do pacote de onda não divergem ao mesmo tempo[56]. Estes resultados foram obtidos analiticamente no limite de não-linearidade suficientemente forte. O espalhamento de um pacote de onda inicialmente localizado em uma ENLS unidimensional com desordem foi recentemente estudada [57]. Foi observado que a localização de Anderson é destruída e uma dinâmica sub-difusiva ocorre acima de um certo comprimento crítico de não-linearidade.

Do ponto de vista experimental, a interface entre desordem e não-linearidade foi investigada [59]. A evolução de ondas lineares e não lineares em acoplamentos ópticos, padrões em guias de onda em substrato de AlGaAs foi diretamente medida. Perturbações não lineares melhoraram a localização de ondas lineares. Na presença da desordem, a transição de uma dinâmica balística do pacote de onda para um caso com localização

exponencial foi observado também neste trabalho.

Dentro de um âmbito mais geral, o estudo da propagação de ondas em sistemas não lineares é um problema muito interessante com muitas aplicações em muitos ramos da física. Por exemplo, usando o modelo de Salerno, com termos diagonais e não diagonais do tipo elétron-fônon, o papel desempenhado pelo parâmetro de não-linearidade e o eventual resultado estatístico da atuação de tais ingredientes foram recentemente estudados[60]. A principal motivação foi explicar o súbito aparecimento de ondas marítimas com amplitudes muito grandes (superior a 20m) em mares relativamente calmos. Ou seja, a conjectura é que o aparecimento de tais ondas esteja relacionado a efeitos não-lineares influenciando na propagação de ondas, neste caso, ondas do mar. O aprisionamento destas ondas em determinadas regiões é o que provocaria ondas enormes, fruto de efeitos não-lineares.

Usualmente, a não-linearidade produzida pela interação elétron-fônon é assumida ser instantânea. Entretanto, esta não-linearidade efetiva é limitada por um tempo de resposta finito do meio e correções são esperadas no regime não-adiabático. Realmente, a relaxação da não-linearidade é conhecida por ter uma profunda influência na dinâmica eletrônica do pacote de onda [61, 62, 10, 63]. Considerando os modelos não-adiabáticos e não-linear, V.M. Kenkre e colaboradores [61, 62], consideraram o problema de um sistema de dois níveis controlado por um processo de relaxação da não-linearidade. Usando cálculos analíticos e numéricos, foi mostrado que há um regime estacionário de auto-aprisionamento e a coexistência de transições estática e dinâmica para certos graus de não-linearidade e tempos de relaxação[61]. Já na ref.[64] os autores estudaram o auto-aprisionamento na chamada junção de Josephson, implementada para o condensado de Bose-Einstein em um poço de potencial duplo. Aqui foi investigado a dinâmica de tunelamento não linear. A evolução da população do poço da direita para a esquerda é visível pelas imagens de absorção. Dessa forma, dependendo do grau de não-linearidade as oscilações de Josephson podem dar lugar ao auto-aprisionamento. Esse fato pode ser observado na Fig.2.2 Mais sobre este tipo de problema pode ser ainda encontrada na referência Ref.[65].

Todas estas características contrastam com a persistente dinâmica oscilatória mostrada pelo modelo do dímero adiabático não-linear em ambos regimes deslocalizado e de auto-aprisionamento[10]. Além disso, os efeitos de temperatura na dinâmica de partículas fortemente interagentes com as vibrações da rede foi estudada analiticamente. Usando o formalismo de Fokker-Planck, foi mostrado que estados estacionários localizados do modelo de um dímero são destruídos acima de uma temperatura crítica.

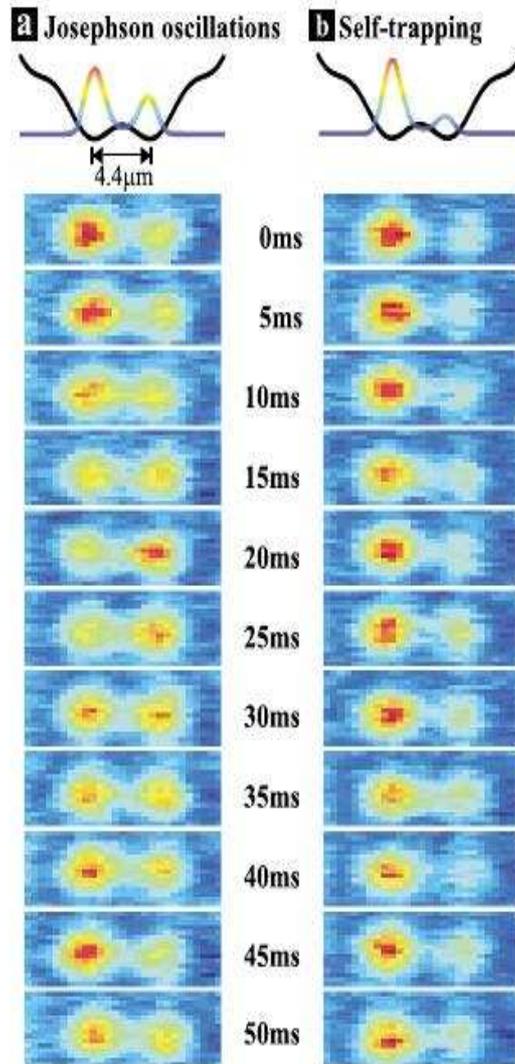


Figura 2.2: Imagens de absorção que mostram a inversão de população em um potencial duplo, retirado da Ref.[64]. Quando efeitos não lineares não são incorporados a), existem uma inversão de população. Em b) percebemos pelas imagens de absorção, que há um auto-aprisionamento que se deve a efeitos de acoplamentos não-lineares.

Neste trabalho, nós focamos para a questão da influência da não-linearidade no transporte eletrônico em cadeias lineares. Este cenário físico é particularmente adequado para o estudo de transporte em macromoléculas, tais como DNA, em que a equação dinâmica semelhante a que descreve acoplamento elétron-fônon desempenha um papel relevante[66, 67, 68, 69].

2.2.2 Modelo

Aqui, nós efetivamente levaremos em consideração a natureza não-adiabática da interação elétron-fônon pela introdução de um atraso de no termo não-linear de terceira ordem, que aparece na ENLS, que descreve a evolução temporal do pacote de onda eletrônico em uma cadeia com interação elétron-fônon. Equações diferenciais com retardo usualmente descrevem sistemas físicos que apresentam tempo de resposta finito. Dentro da aproximação de tight-binding, a evolução temporal dos coeficientes do vetor de onda gerado na base de orbitais localizados ($|\Psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)|j\rangle$) assume a forma:

$$i\dot{c}_j(t) = V(c_{j+1}(t) + c_{j-1}(t)) - \chi|c_j(t - \tau)|^2 c_j(t), \quad (2.25)$$

onde nós usamos $\hbar = 1$ e consideramos o potencial no sítio igual a zero sem perda de generalidade. Nesta equação, V é o termo cinético que relaciona primeiros vizinhos e χ é um parâmetro de não-linearidade o qual é proporcional ao acoplamento elétron-fônon local[63]. A natureza não-adiabática da interação elétron-fônon é representada por uma contribuição retardada no potencial no sítio proporcional a $|c_j(t - \tau)|^2$ onde τ é o tempo típico de resposta. Para analisar a propagação do pacote de onda, nós resolvemos a equação 2.25 usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem obtendo a evolução temporal de um pacote de onda inicialmente localizado ($|\Psi(t=0)\rangle = \sum_j c_j(0)|j\rangle$ com $c_j(0) = \delta_{j,j_0}$). Para estudar o possível auto-aprisionamento do pacote de onda eletrônico, nós seguimos a evolução temporal da amplitude da função de onda em um sítio inicial, calculando a chamada probabilidade de retorno

$$R_0(t) \equiv |c_{j_0}(t)|^2. \quad (2.26)$$

Usualmente o elétron escapa da posição original quando a amplitude $c_{j_0}(t)$ anula-se quando o tempo t evolui. Contrariamente, a amplitude permanece finita para um pacote

de onda localizado. Entretanto a probabilidade de retorno não caracteriza completamente a evolução temporal da função de onda. A fim de ter uma melhor descrição da dinâmica do pacote de onda, nós também calculamos a função número de participação dependente do tempo, definida como:

$$P(t) = \frac{1}{\sum_j |c_j|^4} \quad (2.27)$$

A função participação $P(t)$ é uma estimativa do número de sítios sob os quais o pacote de onda está espalhado em um instante t . No regime de tempos longos, o comportamento de escala pode também ser usado para distinguir entre pacotes de onda localizados e não-localizados[70]. Em particular o número de participação assintótico torna-se independente do tamanho do sistema para pacotes de onda localizados. Isso significa que podemos usar a função de participação para encontrar regiões onde a função de onda propagou-se ou não. Por outro lado a escala linear da função de participação com o tamanho da cadeia é um comportamento presente no regime não-localizado.

2.2.3 Resultados

Em nossas simulações numéricas, usamos o termo cinético V igual a unidade. Na figura Fig.2.3 nós mostramos a evolução temporal da probabilidade de retorno numa cadeia com $N = 2 \times 10^3$ sítios, para o caso de uma não-linearidade instantânea ($\tau = 0$), para parâmetros de não-linearidade muito fortes χ . Este gráfico mostra o comportamento usual para a ENLS com interação elétron-fônon adiabática[3]. Em particular para não-linearidades fortes $\chi > 3.5$, a probabilidade de retorno $R_0(t)$ aproxima-se de um valor constante no limite de tempo longo, o que indica que o pacote de onda está localizado[1, 2]. Este comportamento indica que é sempre possível encontrar a partícula nas vizinhanças do sítio inicial da cadeia. Isto significa que não houve um espalhamento da função de onda eletrônica, ou seja a função de onda está aprisionada e a probabilidade de encontrar a partícula é grande em uma pequena região e praticamente zero no restante da cadeia. Esse fenômeno é o chamado auto-aprisionamento, onde o elétron permanece localizado em torno da posição inicial devido ao seu acoplamento com as vibrações da rede. As vibrações da rede, que deslocam os átomos das suas posições originais, acabam por influenciar na interação entre os átomos e os elétrons, uma vez que como a posição original dos átomos é alterada o potencial percebido pelo elétron também será alterado. Isso pode ocasionar reflexões da função de onda eletrônica e sua conseqüente localização. O que se tem percebido na literatura já citada é que existe um valor crítico para o acoplamento

elétron-fônon que vai determinar o tipo de dinâmica do pacote de onda. Isso acontece por que se o acoplamento não linear, oriundo da interação elétron-fônon não for significativo, o elétron simplesmente não percebe sua presença ou, ela não é suficiente para promover um aprisionamento da função de onda. O que se mostra na literatura recente, é que para $\chi < 3.5$ a probabilidade de retorno é infinitamente pequena (da ordem de $1/N$), o que caracteriza o regime de estados estendidos, já que o retorno pequeno ou muito pequeno, significa que a função de onda foi espalhada através da cadeia. Neste regime o pacote de onda eletrônico espalha-se de forma aproximadamente uniforme através da rede. Na figura Fig.2.3 nós vemos justamente este comportamento, quando a não-linearidade é superior ao valor crítico $\chi = 3.5$, por exemplo $\chi = 5$, observamos que a probabilidade de retorno é praticamente constante (linha tracejada). Isto mostra que a função de onda ficou realmente localizada em torno do sítio inicial, depois de um curto período de tempo. Isso significa que o elétron percebeu quase que de forma instantânea a presença da não-linearidade e teve seu espalhamento fortemente influenciado para um regime isolante. Já para $\chi = 3$, que é um valor abaixo do valor crítico a função que representa a probabilidade de retorno tende a zero rapidamente. O que significa que mesmo com o termo de acoplamento não-linear existindo, ele não foi capaz de promover o aprisionamento da função de onda. Isso significa então, que o elétron foi rapidamente espalhado pela rede, não sendo possível encontrá-lo próximo das regiões do sítio inicial pois essa probabilidade é praticamente nula. Neste caso teremos um regime metálico, com uma função de onda estendida pelo sistema.

Na figura 2.4, nós investigamos o efeito em que o atraso temporal no termo não-linear pode causar nas propriedades de transporte. Esse atraso caracterizado por τ na equação 2.25 pode causar um efeito novo no comportamento dinâmico da função de onda, causando alterações no auto-aprisionamento usual. Nós consideramos um acoplamento elétron-fônon suficientemente forte $\chi = 5$, para induzir o auto-aprisionamento no limite adiabático. Nós observamos que o aumento gradual do atraso temporal leva a uma diminuição da probabilidade de retorno. A probabilidade de retorno vai a zero como mostrado para o caso $\tau = 1$. Este processo de deslocalização, representando a quebra do auto-aprisionamento, este efeito foi induzido pelo retardo. Então observamos com esta figura, que o retardo no termo não-linear pode provocar a quebra no fenômeno de aprisionamento da função de onda eletrônica. O tempo de retardo pode ser entendido como o tempo de resposta ao efeito não linear, provocado pela interação elétron-fônon, ou ainda pode ser comparado com uma relaxação dos acoplamentos elétron-fônon. Esse efeito é

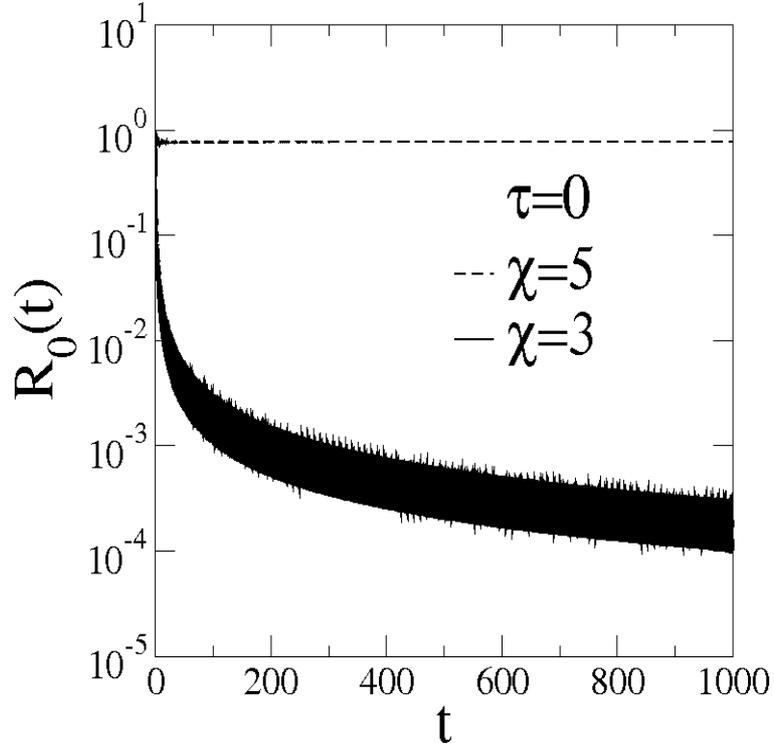


Figura 2.3: Probabilidade de retorno $R_0(t)$ para $\chi = 3$ e $\chi = 5$. Consideramos uma cadeia com $N = 2 \times 10^3$ com uma não-linearidade instantânea. Para um regime de não-linearidade acima de um certo valor crítico a probabilidade de retorno permanece constante, e abaixo da não-linearidade crítica o sistema apresenta característica metálica

muito interessante, uma vez que outros sistemas são descritos pela equação ENLS, logo estas interpretações podem ser aplicadas a estes sistemas. O conhecimento obtido com este estudo pode ser usado por exemplo, para estudar os efeitos de mudança de temperatura nas propriedades de transporte. Certamente uma mudança na temperatura traria mudanças nas vibrações da rede e conseqüentemente na interação elétron-fônon. Em redes ópticas, este conhecimento pode ser usado na construção de chaveamentos ópticos. Neste caso, compreender este mecanismo de mudança de regime devido a um retardo seria de grande importância para essa aplicação.

Na figura 2.5, nós mostramos o número de participação dependente do tempo $P(t)$ no regime não-linear forte ($\chi = 5$), na parte (A). Quando a função de participação assume um valor alto, isso sugere que estamos diante de um regime metálico com muitos sítios

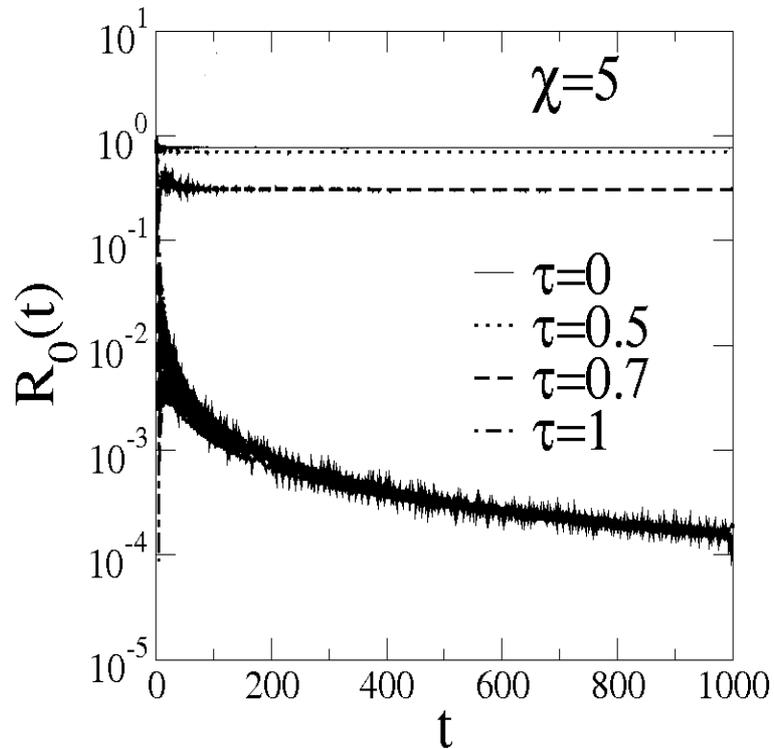


Figura 2.4: Probabilidade de retorno $R_0(t)$ para $\chi = 5$, com vários valores de atraso. Quando o atraso é pequeno $\tau = 0.5$, apenas uma ligeira mudança no retorno é perceptível, porém para valores maiores de τ o retorno tende a zero rapidamente.

participando da função de onda. No caso de um valor baixo para o número de participação nós teremos um regime isolante com poucos sítios participando da função de onda. Em concordância com a probabilidade de retorno, o fenômeno do auto-aprisionamento é destruído quando o retardo temporal é aumentado, com o número de participação tornando-se da ordem do tamanho da cadeia. É interessante observar que o número de participação exibe um platô intermediário no regime não localizado. Este platô está associado ao fato de que, depois de um transiente inicial, o pacote de onda evolui no tempo com um pico na distribuição de probabilidades próximas as frentes de onda. Tal comportamento pode ser visto na parte (B) da figura 2.5, onde vemos que para tempos curtos o pacote de onda espalha rapidamente, isso significa um aumento na função de participação. No entanto, depois de um certo tempo este espalhamento é quase uniforme, deixando o número de participação praticamente constante em uma região. Portanto, o número de participação está associado principalmente a largura das frentes de onda, que são independentes do

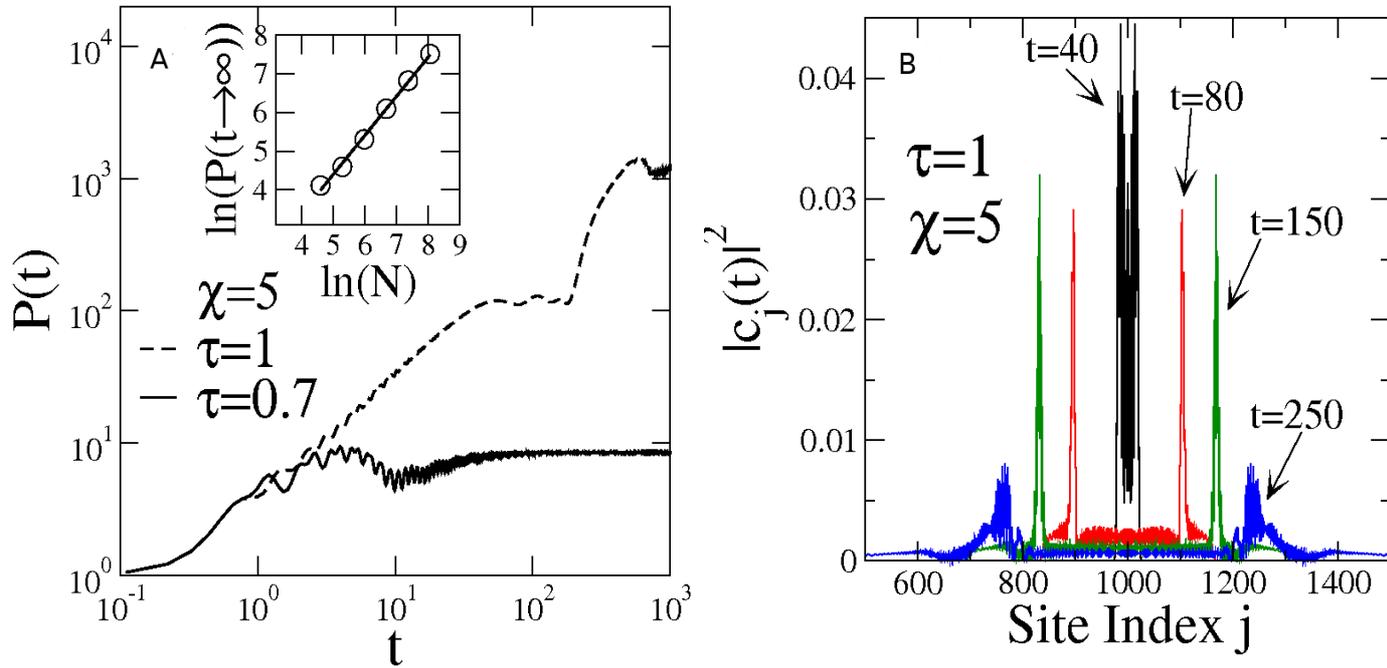


Figura 2.5: A) Função número de participação como uma função do tempo, para $\tau = 0.7$, $\tau = 1$ para $\chi = 5$. Quando o tempo de retardo é aumentado, a função número de participação aumenta, mesmo quando o parâmetro de não linearidade é alto, no caso $\chi = 5$. A inserção do gráfico, mostra o comportamento linear do número de participação com o tamanho do sistema para $\tau = 1$, comportamento típico de estados deslocalizados B) A figura mostra o comportamento do pacote de onda em diferentes tempos. Para tempos curtos a função de onda espalha rapidamente para tempos mais longos, o espalhamento é quase uniforme. Isso pode explicar o aparecimento do platô no gráfico da função de participação

tempo. Este platô persiste até as frentes de onda alcançarem as bordas da cadeia. Depois que a propagação das ondas refletidas tende uniformizar o pacote de onda, o número de participação volta a aumentar. A escala linear de tamanho finito, mostrada no gráfico inserido, caracteriza claramente a natureza não localizada do pacote de onda assintótica neste regime.

Dados para a probabilidade de retorno em tempos longos $R_0(\rightarrow \infty)$ versus o tempo de retardo τ é mostrado na figura 2.6 para não-linearidades fortes variando entre $\chi = 2, 5$ e $\chi = 8$. Estes valores para a probabilidade de retorno foram obtidos por médias estatísticas no regime estacionário. Estes valores são finitos e independem do tamanho da cadeia quando acontece o auto-aprisionamento. No regime metálico, a probabilidade de retorno

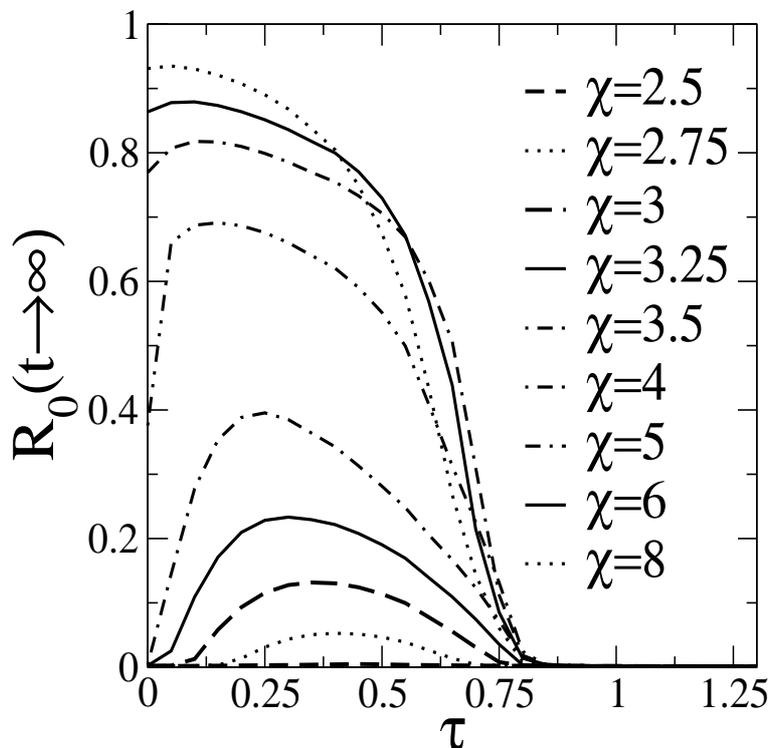


Figura 2.6: Probabilidade de retorno $R_0(t \rightarrow \infty)$ versus o tempo de retardo τ , com a não-linearidade χ variando entre $\chi = 2.5$ e $\chi = 8$. A quebra do auto-aprisionamento acontece para grandes valores de retardo. Para interações elétron-fônon em níveis intermediários $2.5 < \chi < 3.5$, observamos que um pequeno retardo pode induzir auto-aprisionamento [$R_0(t \rightarrow \infty) > 0$] o qual não aparece no limite de não-linearidade instantânea.

anula-se com $1/N$. Para $\chi < 2.5$ a probabilidade de retorno assintótica aproxima-se de zero independentemente do tempo de retardo. Esta figura também mostra que não há auto-aprisionamento para tempo de retardo longo com este valor para o parâmetro de não-linearidade. Na verdade o pacote de onda eletrônico espalha-se substancialmente antes da não-linearidade atuar, resultando em uma fraca resposta do meio. Vamos agora focar para o principal comportamento da probabilidade de retorno para não-linearidades abaixo de um valor crítico no limite adiabática ($\chi < 3.5$). Em contraste com a transição para um regime não localizado induzido por um tempo de retardo grande, um pequeno retardo pode promover um auto-aprisionamento [$R_0(t \rightarrow \infty) > 0$], para não-linearidades entre $2.5 < \chi < 3.5$. A razão física para a diminuição do valor do comprimento de não-linearidade crítica no regime de resposta rápida (onde a não-linearidade é percebida

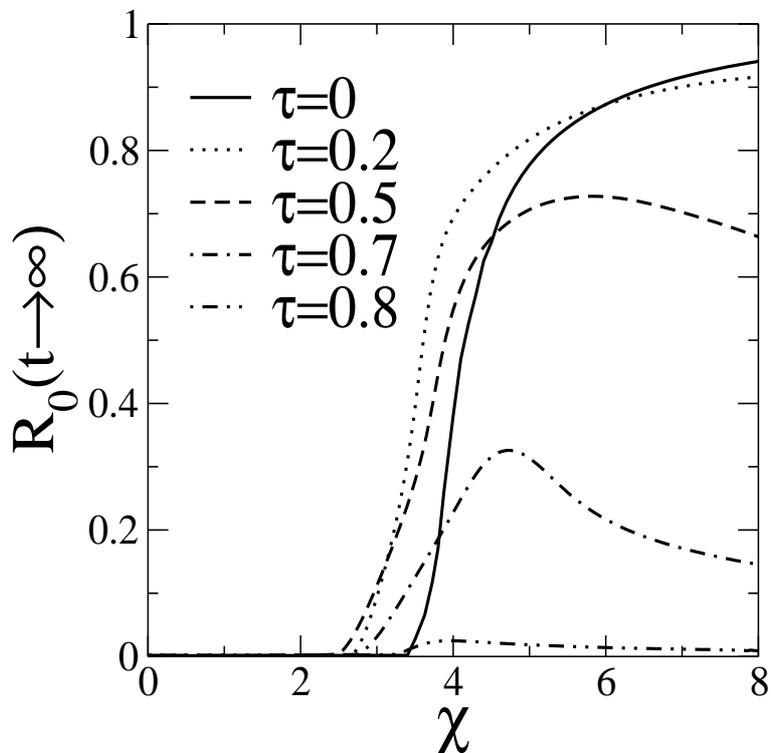


Figura 2.7: Probabilidade de retorno R_0 no limite de $t \rightarrow \infty$ versus comprimento de acoplamento elétron-fônon χ , para valores variando de $\tau = 0$ a $\tau = 0.8$. Uma não-linearidade retardada pode induzir um auto-aprisionamento mesmo para acoplamentos abaixo do valor crítico no limite adiabático $\chi = 3.5$.

rapidamente) é que a não-linearidade vem do acoplamento do elétron com a densidade eletrônica em um tempo prévio. Com o elétron ainda localizado em torno da sua posição inicial no início da evolução do pacote de onda, a densidade eletrônica retardada no sítio inicial é maior que no caso instantâneo. Portanto, um menor comprimento de não-linearidade χ pode promover um auto-aprisionamento, em comparação com o caso instantâneo. Portanto, nossos resultados indicam que o regime de auto-aprisionamento tem uma reentrância característica assumida em regimes de retardos curtos. Na figura Fig2.7, nós mostramos resultados numéricos para a probabilidade de retorno $R_0(t \rightarrow \infty) > 0$ versus o comprimento de acoplamento elétron-fônon χ . Aqui nós consideramos tempos de retardo variando de $\tau = 0$ a $\tau = 0.8$. Estes resultados confirmam os resultados já apresentados. Podemos ver isso ao analisarmos dois pontos. Primeiro, para termos de retardo longos o fenômeno do auto-aprisionamento desaparece, fato que pode ser visto na curva

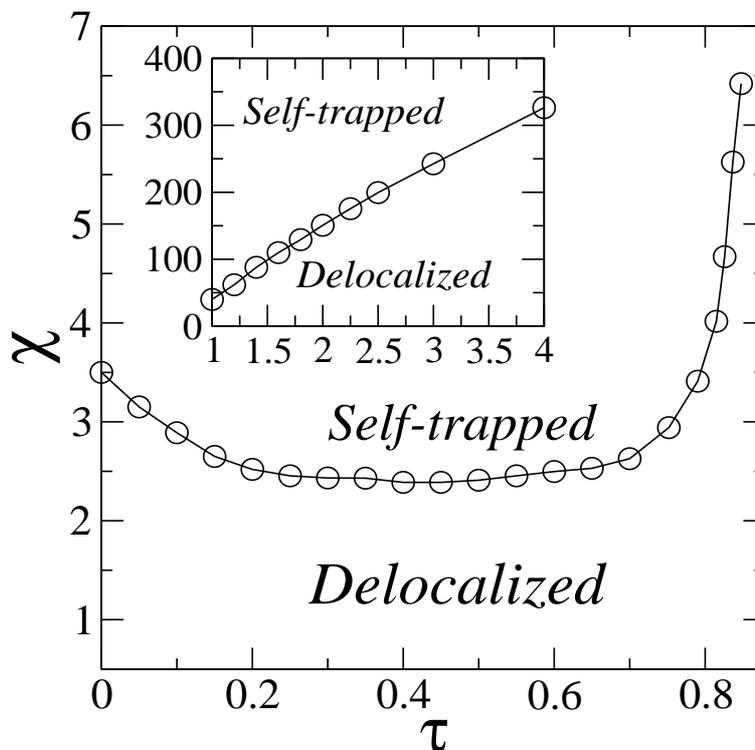


Figura 2.8: Diagrama de fase de χ versus τ mostrando a transição de um regime de estados delocalizados para um regime de auto-aprisionamento induzido por um retardo na interação elétron-fônon. Na inserção, mostramos a linha crítica no regime de tempos longos de resposta, no qual não linearidades fortes são necessárias para promover o auto-aprisionamento.

da Fig2.7 com $\tau = 0.8$ no regime de não-linearidades fortes. Segundo, para pequenos tempos de retardo, o auto-aprisionamento inicia abaixo da não-linearidade crítica do limite adiabático. É interessante observar que a probabilidade de retorno alcança um máximo em um acoplamento finito no regime de tempo de retardo pequenos. Este comportamento também contrasta com o aumento contínuo da probabilidade de retorno para o caso de uma não-linearidade instantânea.

Na figura Fig.2.8, o comportamento da transição é refletida pela dependência do valor crítico χ_c , que indica o valor crítico do comprimento de não-linearidade, quando o retardo τ é aumentado. Os estados estendidos foram caracterizados usando o critério $R_0(t \rightarrow \infty) \approx 1/N$ e $P(t) \rightarrow \infty N$. A ligeira diminuição do parâmetro de não-linearidade crítica para retardo pequeno é trocada para um rápido aumento quando o tempo de

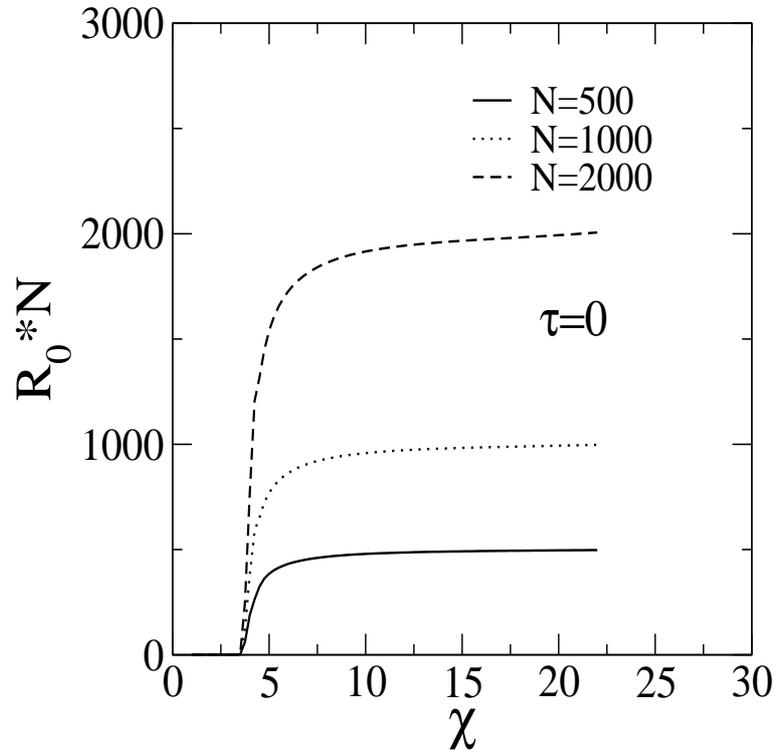


Figura 2.9: Gráfico que mostra o procedimento usado para encontrar os pontos do diagrama de fase. Este gráfico é para $\tau = 0$, probabilidade de retorno vezes o tamanho da cadeia em função de χ . Para todos os outros valores de retardo o mesmo procedimento foi adotado. Para $\tau = 0$ o valor crítico χ_c já é conhecido, $\chi_c = 3.5$, que é o valor crítico para o caso em que temos uma não-linearidade instantânea.

retardo τ é grande como mostra a figura Fig.2.8. Realmente, o pacote de onda espalha-se substancialmente antes da não-linearidade atuar em um meio com uma resposta lenta. O diagrama mostra claramente que para retardo pequeno, podemos ter um valor crítico menor que valor crítico de sistemas com não-linearidade instantânea. Este gráfico foi obtido sobrepondo gráficos da probabilidade de retorno $R_0(t)$ versus χ para tamanhos de rede diferentes. No ponto crítico esta função independe do tamanho da cadeia, e assim foi possível encontrar o ponto crítico. Cada ponto do diagrama de fase foi obtido por um gráfico de superposição de vários tamanho de cadeia, para cada τ um gráfico de superposição e um ponto no diagrama de fase, procedimento ilustrado na figura Fig.2.9.

Neste trabalho, consideramos o problema de um elétron se movendo em uma cadeia sob a influencia de uma não-linearidade não instantânea cujos efeitos incorporam

efetivamente uma interação elétron-fônon adiabática. No caso de uma não-linearidade com resposta instantânea este sistema apresenta uma transição de um regime estendido para o auto-aprisionado com um parâmetro de não-linearidade $\chi \approx 3.5$. Nós encontramos para o caso de retardo longo, o auto-aprisionamento ocorre somente para parâmetros de não-linearidades altos. Como uma consequência, o transporte eletrônico retém sua característica metálica, respondendo fracamente à presença da não-linearidade do meio. Por outro lado, o sistema apresenta auto-aprisionamento, quando estamos em um regime de resposta rápida, abaixo do valor crítico de parâmetro de não-linearidade observado para uma não-linearidade instantânea.

Capítulo 3

Comportamento dinâmico e estatística dos níveis no Modelo de Anderson bidimensional com desordem diluída

3.1 Desordem Diluída

No estudo de sólidos que apresentam algum tipo de desordem, o modelo de Anderson [1] desempenha um papel fundamental, uma vez que reuni ingredientes básicos para modelar tipos variados de desordem. Como visto no capítulo introdutório, o Hamiltoniano do modelo de Anderson é dada por:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j|. \quad (3.1)$$

No Hamiltoniano original do modelo de Anderson, os termos ϵ_i eram gerados de forma aleatória e a ocorrência de uma transição metal isolante era limitada pela dimensionalidade do sistema. No primeiro capítulo, vimos que a teoria de escala para a transição de Anderson pode ser violada dependendo do tipo de desordem inserida no sistema. Entre os modelos com desordem diluída, o modelo de Anderson vem atraindo grande interesse nos últimos anos [74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81]. Na referência [74] foi introduzido um modelo de Anderson com desordem diagonal diluída por uma periodicidade fundamental. Este modelo consiste de duas subredes, uma composta de potências aleatórios (energias

aleatórias nos sítios) que caracteriza uma rede de Anderson , e outra subrede composta por sítios com potenciais constantes. Um modelo similar foi usado para estudar as propriedades eletrônicas de ligas semicondutoras[76]. A existência de estados estendidos no centro da banda foi demonstrada numericamente nesta referência. O modelo de Anderson diluído foi estendido para incluir uma diluição geral, a qual define as energias on-site aleatórias espalhadas pelo sistema[75]. Foi demonstrado neste modelo que um conjunto de estados estendidos pode aparecer, e que os mesmos são fortemente dependentes do comprimento do seguimento de diluição e da simetria da função de diluição. Recentemente mostrou-se que a presença de novos modos estendidos no modelo de Anderson unidimensional diluído promovem um espalhamento sub-difusivo de um pacote de onda eletrônico inicialmente localizado[79]. Neste artigo os autores estudaram a dinâmica de um pacote de onda eletrônico, no modelo de Anderson diluído, onde as impurezas da cadeia de Anderson unidimensional era diluída por uma função periódica $f(l)$. Neste trabalho os estados estendidos foram investigados, observou-se que o número destes estados estendidos está relacionado com a simetria da função de diluição $f(l)$. Na extensão para uma geometria de rede quadrada foi mostrada que, este modelo pode exibir uma verdadeira transição metal-isolante com pequenas regiões de energia delimitando regiões de estados estendidos e localizados[80]. No caso de uma rede bidimensional a desordem é incorporada em linhas alternada e o modelo exibe uma transição metal-isolante, com uma banda de estados estendidos. Um comprimento de correlação finito, favorece o sistema a comportar-se como condutor antes de tornar-se eventualmente um isolante.

Já a referência [81], traz um estudo em detalhes da dinâmica de um pacote de onda em uma dimensão para o modelo de Anderson diluído. Neste trabalho o elétron iniciava completamente localizado em um sítio próximo do centro da cadeia. A partir dessa configuração inicial e da solução da equação de Schrödinger, foi então observado um tempo de memória governado efetivamente pelo espalhamento da função de onda para elétrons inicialmente localizados em sítios com potencial distribuído de forma aleatórias ou uma rede pura. O trabalho realizado na referência Ref.[81], traz o termo de hopping colocado como constante igual a unidade. Os autores consideraram um modelo que consiste de uma cadeia com potencial constante intercalada a uma outra cadeia com potenciais aleatórios. Desta forma existiam duas cadeias interpenetrantes, sendo uma com potencial constante e outra com potencial aleatório não correlacionado. Os autores consideraram o potencial da subrede periódica como sendo ϵ_0 e o potencial da sub-rede aleatória, dada por potenciais ϵ_n , que são gerados aleatoriamente formando uma cadeia de Anderson. Estes valores variavam dentro de um intervalo de $[-5, 5]$. A largura da desordem consid-

erada bem maior que a amplitude de hopping, uma vez que neste limite, comportamentos transientes ocorrem em uma escala de tempo mais curta. Foi observado que a função de onda nestas circunstâncias é sensível às condições iniciais. Um pacote de onda eletrônico inicialmente localizado em um sítio da sub-rede de Anderson não possui contribuições vinda do estado estendido, porque as amplitudes para estes estados serão nulas na sub-rede aleatória. Verificou-se que os estados estendidos encontram-se na cadeia diluída, ou seja na cadeia de potenciais não aleatórios.

A importância de estudar sistemas bidimensionais se traduz na aplicabilidade e experimentos que têm sido realizados com a finalidade de analisar sistemas reais. O estudo do comportamento de filmes finos metálicos e mesmo de Si-MOSFET's (metal-oxide-semiconductor field-effect transistors)[82], são grandes exemplos disso. Essa referência traz uma série de resultados experimentais, que mostram um comportamento metálico abaixo de uma certa temperatura, onde a resistividade tem forte dependência com a temperatura $d\rho/dT > 0$, comportamento que foi observado em um sistema bidimensional acima de um certo valor de densidade eletrônica crítica n_c , que é tratada no artigo. Abaixo da densidade eletrônica crítica o comportamento da resistividade será diferente $d\rho/dT < 0$, apresentando um comportamento tipicamente isolante. Este fatos mostram indícios de uma transição metal isolante em tais sistemas.

O modelo de Anderson com desordem diluída também é usado para estudar modos vibracionais em cadeias com desordem diluída unidimensionais [83]. Neste contexto, agora em um sistema unidimensional, tal modelo diluído é usado para estudar o comportamento dos fônons em sistemas amorfos. Pode ser visto avanços nessa área de estudo[84, 85, 86]. Neste problema podemos observar o transporte de energia através dos fônons, o que pode ser feito por exemplo, calculando-se a evolução temporal do desvio médio quadrado de um pulso energético inicialmente localizado no material. Para este caso portanto, é usada a mesma abordagem do modelo de Anderson diluído, quando o comportamento dinâmico de um pacote de onda é estudado. O desvio médio quadrático pode então caracterizar o comportamento dinâmico de tais sistemas com a vantagem de não depender das condições de contorno do sistema. Na referência [83] é discutido por exemplo que no estudo dinâmico dos modos vibracionais, o desvio médio quadrático apresenta super-difusão quando a decomposição espectral do pulso inicial contém frequência baixa e, sub-difusão quando os modos de frequência baixa são excluídos do pulso inicial. O modelo de Anderson com desordem diluída, usado no estudo do transporte de energia, pode ser gerado introduzindo-se um átomo de massa constante, m_0 , entre átomos de uma rede desordenada, de forma similar ao caso eletrônico onde o modelo de Anderson diluído tem sítios com energia

constante e sítios com energia aleatório.

Voltando ao problema bidimensional, a referência [80] traz um estudo sobre um sistema de elétrons não interagentes, usando um modelo com desordem diluída. A ênfase de que o sistema é composto de elétrons não interagentes é dada aqui devido ao fato de que interação entre elétrons tem sido conjecturada como um possível mecanismo para um comportamento metálico [87]. Na referência [80] foi considerado um modelo de Anderson tight-binding, com a desordem diluída. A diluição é feita usando a seguinte regra para distribuir as energias nos sítios: $\epsilon_{2n,m} = 0$ e $\epsilon_{2n+1,m} = \epsilon_0$. O valor ϵ_0 representa um potencial aleatório, o que significa que neste modelo aparecem linhas com coordenada x ímpar aleatória, e linhas com coordenada x par, com potencial puro. Este tipo de configuração produz uma solução do tipo $\psi_{n,m} = \cos(n\pi/2)e^{ikm}$ e com energias $E = 2\cos(k)$. Há então uma banda de estados estendidos onde a condutância é diferente de zero. A condutância é nula fora do centro da banda. Isso é indício do surgimento de uma banda de estados estendidos em torno do centro da banda, o que sugere a existência de uma transição metal-isolante. Hilke então, trabalhou inicialmente com o comprimento de correlação $l = 0$ (descorrelacionado) e depois com l finito. O autor considerou ainda um sistema quase-unidimensional com uma direção tendo um tamanho finito L para a direção n e infinito para a direção m . No meio então deste sistema foi introduzido N_I impurezas de tamanho retangular. Depois foi calculado a condutância do sistema usando um método padrão de matriz de transferência. Foi visto portanto neste trabalho, entre outros resultados o impacto das correlações sobre as propriedades de localização do sistema. Para o caso não puro com rede de potenciais aleatórios, o sistema exibe uma verdadeira transição metal-isolante. A grande flutuação da condutância e o comportamento metálico de sistemas experimentais podem ser explicados por altos valores do comprimento de correlação. Foi observado também que a condutividade é função do número de impurezas N_I e que então o comprimento de localização é dado por $L_C \propto N_I^{-1/2}$

Muitos resultados, vêm mostrando que a condição de localização dos estados eletrônicos independentes da quantidade da desordem para dimensão menor ou igual a dois pode ser violada. Mais que isso, estes sistemas tem se mostrado de grande importância experimental, o que os torna muito importantes no entendimento de sistemas físicos reais. Diante disto, comportamentos da dinâmica do modelo de Anderson com diluição por sítio, onde a desordem é diluída no sistema, juntamente com sítios de potenciais puros (potenciais com valor constante), podem apresentar características interessantes com efeitos de aplicabilidade prática, sobretudo sistemas bidimensionais. Neste capítulo mostraremos um estudo da influência de uma distribuição de desordem diluída, nos auto-estados do

modelo de Anderson bidimensional. Inicialmente mostraremos um pouco sobre a teoria de matriz aleatória, muito importante na caracterização do tipo de comportamento de sistemas quânticos, quando se tem informações reduzidas sobre o mesmo. Dessa teoria podemos ver as leis de distribuição de espaçamentos de níveis. De acordo com cada matriz, podemos chegar a uma distribuição de espaçamentos de níveis correspondente. Posteriormente veremos o modelo e os resultados obtidos para este problema.

Há uma riqueza de evidências empíricas e numéricas, que sugerem universalidade para flutuações locais nas energias quânticas ou espectro das energias do sistema que mostram características globais. Geralmente matrizes que representam Hamiltonianos produzem um mesmo espectro promovido por um mesmo grupo de transformações canônicas. Em particular, a distribuição de espaçamento dos níveis $P(S)$ toma geralmente a forma característica da classe de universalidade, definida pelo grupo canônico. O espectro de sistemas quânticos simples tais como o átomo de hidrogênio e o átomo de hélio tem sido bem entendidos usando mecânica quântica. Entretanto, a aplicação de mecânica quântica para alguns tipos de elementos parece ser complicado. Uma forma de estudar as propriedades espectrais de tais sistemas é construir modelos com o mínimo de informação, sem perder a parte física essencial. Este é exatamente a principal característica da teoria de matriz aleatória, (do inglês Random Matrix Theory- RMT).

Wigner foi o primeiro a propor o uso de um ensemble de matriz aleatória para um complicado modelo no qual uma matriz Hamiltoniana descrevia um núcleo pesado[88]. Na teoria de matriz aleatória, temos uma matriz quadrada H de tamanho $n \times n$, onde tomamos o limite no qual $n \rightarrow \infty$, onde estes elementos H_{nm} podem ser obtidos de uma distribuição Gaussiana. Neste contexto a estatística dos níveis de energia do sistema, pode dizer algo sobre seu comportamento. Em geral, de acordo com a estatística de níveis, descrita por uma função de distribuição que mede o espaçamento entre níveis eletrônicos do sistema. A classe de universalidade surge como condição de simetria no ensemble gaussiano de matriz aleatória. Isso corresponde, a classificar os sistemas com quebra ou não de simetria, com ou sem interação de spins, que devem ser características da classe de universalidade na qual o sistema estiver incluso. No trato matricial, pode haver uma invariância em transformações ortogonal, unitária ou simplética levando a três ensemble gaussianos de interesse: Ensemble Gaussiano Ortogonal(GOE), Ensemble Gaussiano Unitário (GUE) ou Ensemble Gaussiano Simplético(GSE). Uma descrição mais detalhada sobre o assunto pode ser encontrada na referência Ref.[7].

A distribuição dos espaçamentos de níveis dá uma idéia da universalidade, isso significa

que em um sistema quântico, terá suas propriedades estatísticas do espectro descritas de acordo com algumas previsões universais e detalhes microscópicos do sistema. Resultados experimentais e numéricos evidenciam essa universalidade[89]. Um dos sucessos da RTM é justamente a previsão correta da distribuição dos espaçamentos dos níveis:

$$S_n = \frac{E_{n+1} - E_n}{\Delta(E)}, \quad (3.2)$$

onde as energias E_n , são as auto-energias ordenadas e $\Delta(E)$ é o espaçamento médio dos níveis.

A distribuição dos espaçamentos de níveis de energia é uma quantidade mensurável em experimentos, nos quais foram feitas curvas indicando a distribuição de níveis, como o do átomo de hidrogênio em um campo magnético forte[90], uma molécula de NO_2 [91]. A figura Fig.3.1, traz uma figura que mostra a distribuição de níveis para um átomo de hidrogênio em um campo magnético forte. A figura traz dois ajustes para a distribuição, uma linha cheia representando uma distribuição do tipo GOE e outra linha tracejada representando uma distribuição do tipo Poisson.

Mostraremos agora, como proceder para encontrar as funções de distribuição, usando uma matriz 2×2 para mostrar a distribuição dos espaçamentos de níveis $P(S)$ em um GOE e GUE. Essa discussão está baseado na referência Ref.[46]. Consideremos a Hamiltoniana :

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a + b & x + iy \\ x - iy & a - b \end{pmatrix}.$$

Nesta representação matricial a, b, x , e y são números reais. Para o caso GOE, o Hamiltoniana é real e simétrica então y anula-se, em contrapartida para o caso GUE $y \neq 0$. Desde que haja apenas dois autovalores associados com a matriz 2×2 , há apenas um espaçamento de nível a ser considerado:

$$S = E_2 - E_1 = \sqrt{b^2 + x^2 + y^2}. \quad (3.3)$$

Supondo uma distribuição gaussiana W para as variáveis b , x e y , obtemos no caso de

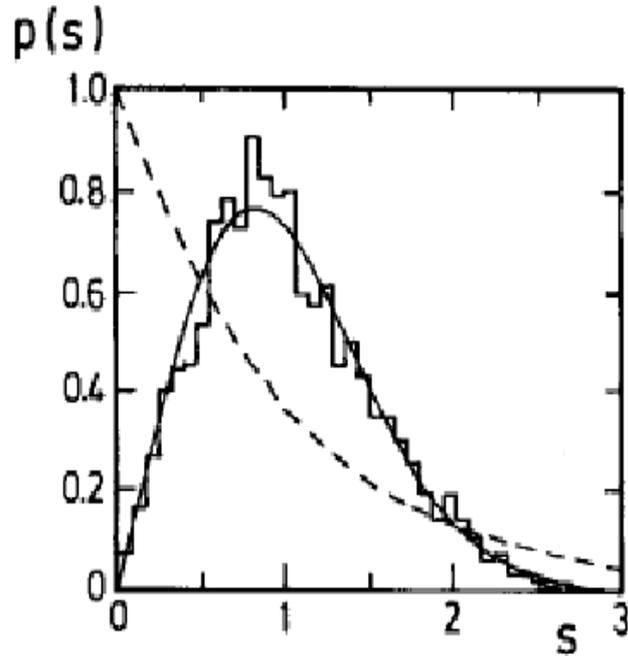


Figura 3.1: Função que mostra a distribuição de espaçamentos de níveis para o átomo de hidrogênio, a linha pontilhada é um ajuste do tipo Poisson e a linha cheia é um ajuste do tipo GOE. Figura retirada da ref[7].

GOE:

$$\begin{aligned}
 P(S) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} db dx W(b, x) \delta(S - \sqrt{b^2 + x^2}) \\
 &= 2\pi \int_0^{\infty} dr r \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} \delta(S - r) \\
 &= \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} S e^{-\frac{S^2}{2\sigma^2}} \\
 &= \frac{\pi}{2} S e^{-\frac{\pi}{4} S^2}, \tag{3.4}
 \end{aligned}$$

onde, no último passo foi usado a condição de normalização da função de probabilidade

$P(S)$. Aplicando o mesmo cálculo para o caso de GUE, teremos:

$$\begin{aligned}
P(S) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dbdydx W(b, x, y) \delta(S - \sqrt{b^2 + x^2 + y^2}) \\
&= 4\pi \int_0^{\infty} dr r^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} \delta(S - r) \\
&= \frac{\sqrt{8\pi}}{\sigma} S^2 e^{-\frac{S^2}{2\sigma^2}} \\
&= \frac{32}{\pi^2} S^2 e^{-\frac{4}{\pi} S^2}.
\end{aligned} \tag{3.5}$$

No entanto, existem sistemas que apresentam um outro tipo de distribuição dos espaçamentos dos níveis igualmente importante. Estes sistemas apresentam uma distribuição do tipo exponencial dos espaçamentos de níveis e é chamada de distribuição de Poisson. Nestes sistemas os autovalores são descorrelacionados. Há portanto a probabilidade $P(S)dS$ de encontrar um autovalor em um intervalo $[S, S + dS]$. Divide-se então o intervalo $[0, S]$ em N subintervalos equidistantes de comprimento S/N . Desde que os autovalores sejam descorrelacionados, a probabilidade de encontrar um autovalor entre $[S, S + dS]$ é então dada por :

$$P(S)dS = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{S}{N}\right)^N dS \tag{3.6}$$

Onde o cálculo do limite acima resulta em uma distribuição do tipo Poisson,

$$P(S) = e^{-S}, \tag{3.7}$$

cujo aparecimento é comum em certos sistemas quânticos. Nosso interesse na teoria da matriz aleatória, reside no fato de que ela é amplamente usada para o estudo de materiais desordenados, pois mostra assinaturas do comportamento do sistema[92]. No regime metálico, os auto-estados do sistemas são estendidos, e as propriedades estatísticas do seu espectro são bem descritas pela RMT. Em particular, a distribuição de espaçamento de níveis é bem representada por uma distribuição do tipo Wigner da classe de simetria apropriada. No regime localizado, os níveis tornam-se descorrelacionados levando a uma distribuição de espaçamentos de níveis do tipo Poisson, e as autofunções são exponencialmente localizadas. Dessa forma este conhecimento do comportamento da função

distribuição do espaçamento de níveis apresentada pelo sistema, pode ser usada para o estudo de sistemas com transição metal-isolante.

Na próxima seção mostraremos o modelo que estudamos com desordem diluída, e posteriormente mostraremos nossos resultados.

3.2 Modelo de Anderson bidimensional com desordem diluída

Nós consideramos um Hamiltoniano de Anderson padrão, com desordem nas energias nos sítios, em uma rede regular $N \times N$. Como estudado em alguns trabalhos[93, 94], este Hamiltoniano tem a forma:

$$H = \sum_{i,m} \epsilon_{im} |im\rangle \langle im| + t \sum_{\langle im,jn\rangle} (|im\rangle \langle jn| + |jn\rangle \langle im|), \quad (3.8)$$

onde $|i, m\rangle$ é um estado de Wannier localizado no sítio (i, m) . A desordem é introduzida nas energias nos sítios ϵ_{im} , as quais são números não correlacionados e escolhidos uniformemente no intervalo de $[-W, W]$. Em nossos cálculos, nós usaremos unidades de energia tais que o termo de hopping seja $t = 1$. O modelo de Anderson diluído bidimensional é construído pela introdução na equação 3.8 de uma nova distribuição de energias on-site definida por:

$$\epsilon_{im} = \begin{cases} \nu_{im}, & \text{para } m \text{ ímpar} \\ \beta_0, & \text{para } m \text{ par.} \end{cases} \quad (3.9)$$

Onde ν_{im} são números aleatórios escolhidos de forma uniforme no intervalo entre $[-W, W]$. Nós começamos inicialmente considerando uma participação modificada $\xi^{i(m)}$ e suas flutuações. Em nossos cálculos nós permitimos uma definição usual da função de participação[38] $[P(E) = 1/(\sum_{i,m} |c_{i(m)}(E)|^4)]$, para definirmos $\xi^{i(m)}$:

$$\xi^{i(m)} = \frac{1}{\sum_{i(m)=1}^N |c_{i(m)}|^4} \quad (3.10)$$

onde $|c_{i(m)}| = \sqrt{\sum_{m(i)} |c_{i,m}|^2}$ é o valor da função de onda na linha $i(m)$. Em geral a participação, $\xi^{i(m)}$ mede o número de sítios ao longo da direção $i(m)$ que participam da

função de onda [38]. Outra quantidade importante que pode ser somada a esta informação, e que diz respeito a estrutura eletrônica acima, é a condutância. A condutância, para elétrons e dentro da teoria de resposta linear, em zero de temperatura, é dada pela fórmula de Kubo-Greenwood, em unidades de e^2/\hbar [95]:

$$G(E) = \frac{2\pi}{\Omega} \sum_{a,b} |\langle a|xH - Hx|b\rangle|^2 \delta(E - E_a) \delta(E - E_b) \quad (3.11)$$

Esta equação relaciona informações eletrônicas com propriedades elétricas do sistema. Se há estados estendidos, a condutância tem um valor finito, entretanto, se apenas estados localizados estão presentes, a condutância é zero no limite termodinâmico. A fórmula de Kubo para a condutância, parte do princípio que a condutância pode ser dada por $G = \frac{W}{L}\sigma$, onde σ é uma condutividade local, W é a área da seção cruzada e L o comprimento da amostra. A fórmula de Kubo para condutividade pode ser vista em livros texto como [96, 97] bem como nos artigos de Kubo e Greenwood[98, 99]. Na equação Eq.3.11, temos que Ω é a área do sistema, x é o operador posição, a e b rotulam auto-estados de energia. O termo ao quadrado representa os elementos de matriz do operador momento em uma direção específica. Essa grandeza portanto, é também uma medida do grau de localização da função de onda eletrônica. Para estados localizados a velocidade média do pacote de onda eletrônico é muito pequena, logo os elementos de matriz do operador momento, constantes na fórmula de Kubo devem fazer com que a condutância se anule neste caso. Por outro lado para uma função de onda estendida a velocidade do pacote deve ser diferente de zero, fazendo com que a condutância também tenha um valor não nulo.

Podemos ainda estudar a evolução dinâmica de um pacote de onda inicialmente localizado neste modelo bidimensional diluído. Usando as amplitudes de Wannier a equação de Schrödinger dependente do tempo, com ($\hbar = 1$) [93, 100], é dada por:

$$\begin{aligned} i \frac{dc_{i,m}(t)}{dt} &= \epsilon_{i,m} c_{i,m}(t) + t(c_{i,m-1}(t) + c_{i,m+1}(t)) \\ &+ c_{i-1,m}(t) + c_{i+1,m}(t), \\ i &, m = 1, 2, \dots N. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Consideremos um pacote de onda inicialmente localizado em um sítio $i_0 = N/2$, $m_0 = N/2$, representado em $t = 0$ por suas auto-funções $|\Phi(t = 0)\rangle = c_{i_0, m_0}(t = 0) = 1$. O

conjunto de equações acima podem ser resolvidas numericamente pelo uso de um método baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal $V(\Delta t)$:

$$V(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!} \quad (3.13)$$

Onde H é o Hamiltoniano. A função de onda em um tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. O método pode ser usado recursivamente para obter funções de onda em um tempo t . O cálculo do produto $V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$ pode ser feito da seguinte forma: Considere $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_{i,m} c_{i,m}(t=0)|i,m\rangle$; o operador $V(\Delta t)$ consiste basicamente de uma soma de potências do operador H . Precisamos então, calcular $H^l \sum_{i,m} c_{i,m}^0 |i,m\rangle$ onde $c_{i,m}^0 = c_{i,m}(t=0)$. Através da definição do Hamiltoniano e da equação de Schrödinger podemos definir que $H^1 \sum_{i,m} c_{i,m}^0 |i,m\rangle = \sum_{i,m} c_{i,m}^1 |i,m\rangle$ onde

$$c_{i,m}^1 = \epsilon_{i,m} c_{i,m}^0 + t(c_{i,m-1}^0 + c_{i,m+1}^0 + c_{i-1,m}^0 + c_{i+1,m}^0), \quad i, m = 1, 2, \dots, N. \quad (3.14)$$

Portanto, podemos definir um produto geral $H^l \sum_{i,m} c_{i,m}^0 |i,m\rangle = \sum_{i,m} c_{i,m}^l |i,m\rangle$ e calcular os coeficientes $c_{i,m}^l$ através da formula :

$$c_{i,m}^l = \epsilon_{i,m} c_{i,m}^{l-1} + t(c_{i,m-1}^{l-1} + c_{i,m+1}^{l-1} + c_{i-1,m}^{l-1} + c_{i+1,m}^{l-1}), \quad i, m = 1, 2, \dots, N. \quad (3.15)$$

Após ter resolvido a equação de Schrödinger calculamos três grandezas, usadas como ferramentas para caracterizar o comportamento dinâmico do sistema. Estas grandezas são definidas como:

$$\begin{cases} \sigma_m(t) = \sqrt{\sum_{i,m=1}^N (m - m_0)^2 |c_{i,m}(t)|^2}, \\ \sigma_i(t) = \sqrt{\sum_{i,m=1}^N (i - i_0)^2 |c_{i,m}(t)|^2}. \end{cases} \quad (3.16)$$

Nestas equações, a grandeza $\sigma_m(t)$, é o alargamento médio na direção m (perpendicular a direção de diluição) e $\sigma_i(t)$, representa o alargamento médio na direção i (direção da diluição).

Um dos objetivos principais deste trabalho é estudar os efeitos da desordem diluída bidimensional na estatística de espaçamento de níveis. Para sistemas bidimensionais com desordem não correlacionada todos os auto-estados são localizados e a distribuição dos espaçamentos de níveis é do tipo lei de Poisson $P(s) \propto \exp(-s)$ onde s é o espaçamento de níveis em unidades de espaçamento médio, já previamente definida em 3.2. Em con-

trpartida, modelos com auto-funções deslocalizadas, têm seus espaçamentos de níveis de energia caracterizados pela fórmula de Wigner $P(s) \propto s \exp(-Cs^2)$.

Em geometrias tridimensionais, na transição de Anderson uma nova classe de universalidade com uma estatística crítica intermediária entre Wigner e Poisson tem sido sugerida como uma consequência da multifractalidade de funções de onda $P(s) \propto s \exp(-Cs^\alpha)$ [101]. Aqui, para obter a distribuição de espaçamento de níveis, foi usada uma janela de energia próxima do centro da banda $(-1, 1)$. A distribuição dos espaçamentos de níveis foi calculada usando $N \times N = 100 \times 100 = 10000$ sítios sobre 1000 realizações de desordem distintas.

3.3 Resultados

Nesta seção vamos apresentar nossos resultados sobre as propriedades de transporte eletrônico bem como as propriedades espectrais em sistemas bidimensionais com desordem diluída. O operador Hamiltoniano (eq. 3.8) foi diagonalizado utilizando rotinas da biblioteca LAPACK. Aplicamos o formalismo de diagonalização em sistemas com até 10000 sítios. Vamos iniciar apresentando os resultados para funções de participação. A figura Fig.3.2(a) mostra a funções de participação na direção da diluição escalada (ξ_i/N) calculada para sistemas com $N \times N = 40 \times 40$ até $N \times N = 100 \times 100$ sítios e $W = 5$. Para cada tamanho de rede o número de realizações foi escolhido de maneira a manter o número de auto-estados calculados, aproximadamente 10^6 , constante. Desta forma a barra de erros dos dados é aproximadamente do tamanho dos símbolos. Para energias dentro do intervalo $[-2, 2]$, o que pode ser observado é que a função participação na escala (ξ_i/N) permanece constante quando N cresce. Este resultado sugere que, os modos com energia dentro deste intervalo são completamente estendidos na direção da diluição. Quando a energia se afasta do centro da banda a função de participação não depende do tamanho do sistema, o que é uma assinatura de estados localizados. Já na figura 3.2(b), mostramos a participação na direção perpendicular a diluição escalada (ξ_m/N) . O gráfico mostra que a função participação escalada diminui quando o tamanho do sistema N , cresce. Este resultado sugere que nesta direção os modos eletrônicos são localizados.

No gráfico 3.3, mostramos a condutância calculada usando a fórmula de Kubo dada pela Eq.3.11. A condutância, foi outra grandeza que calculamos, uma vez que ela auxilia no mapeamento de estados estendidos e localizados. Condutância finita indica estados estendidos e uma condutância que tende a zero sugere estados localizados, como comentado anteriormente. Para obter a condutância, diagonalizamos sistemas com $N \times$

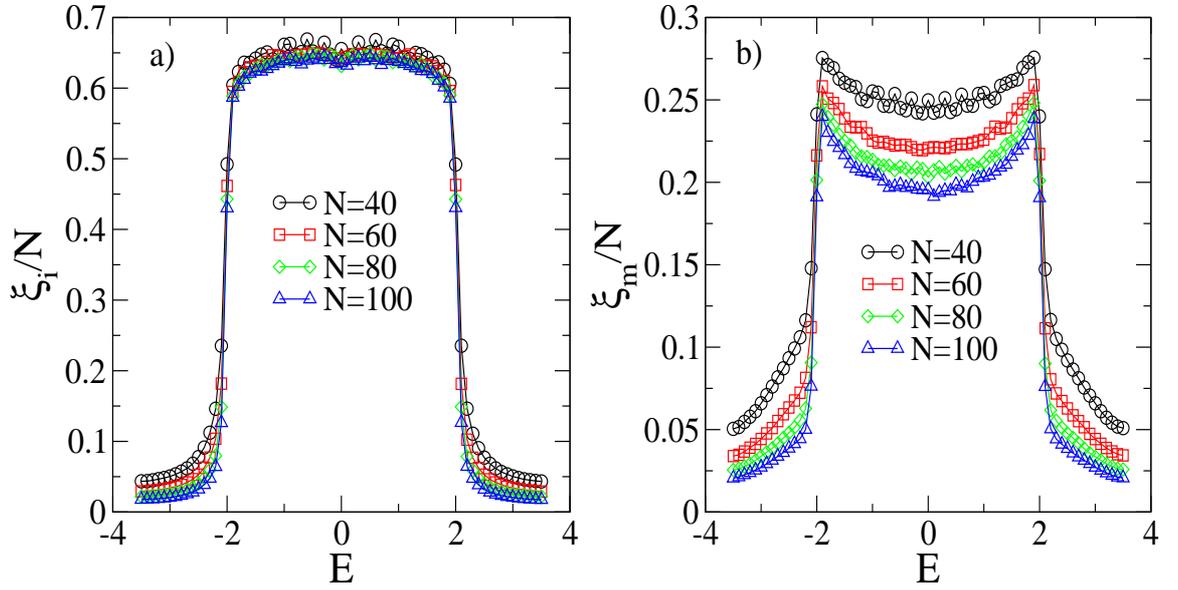


Figura 3.2: (a) Função participação escalada ξ_i/N em função da energia. Essa função mede a participação calculada na direção de diluição i . No centro da banda esta função independe do tamanho da rede (b) Função participação ξ_m/N em função da energia. Essa função mede a participação calculada na direção perpendicular a diluição. No centro da banda esta função tende a zero quando N diverge.

$N = 40 \times 40$ até $N \times N = 100 \times 100$ sítios, $W = 5$ e 500 amostras. Na figura 3.3(a) mostramos a condutância G_i na direção da diluição versus energia e na figura 3.3(b) a condutância G_m calculada na direção perpendicular. Na direção da diluição a condutância cresce com N enquanto que na direção perpendicular a condutância, além de ser uma ordem de grandeza menor, não tem nenhuma sensibilidade a mudanças no tamanho do sistema. Este resultados corroboram os resultados encontrados através do cálculo da participação, em torno do centro da banda existem estados estendidos ao longo das linhas de diluição da desordem. Em linhas gerais, a existência de uma fase metálica em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem diluída, foi previsto por Hilke [80] através de métodos analíticos e usando um formalismo numérico de Matriz de transferência.

Vamos agora apresentar um estudo sobre os efeitos desta fase metálica na dinâmica eletrônica. Vamos aplicar o formalismo de integração numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo até a ordem $n_0 = 20$ e $\Delta t = 0.05$. A conservação da norma da função de onda foi obtida com precisão $|1 - \sum_{i,m} |c_{i,m}|^2| \ll 10^{-8}$. Resolvemos a equação usando

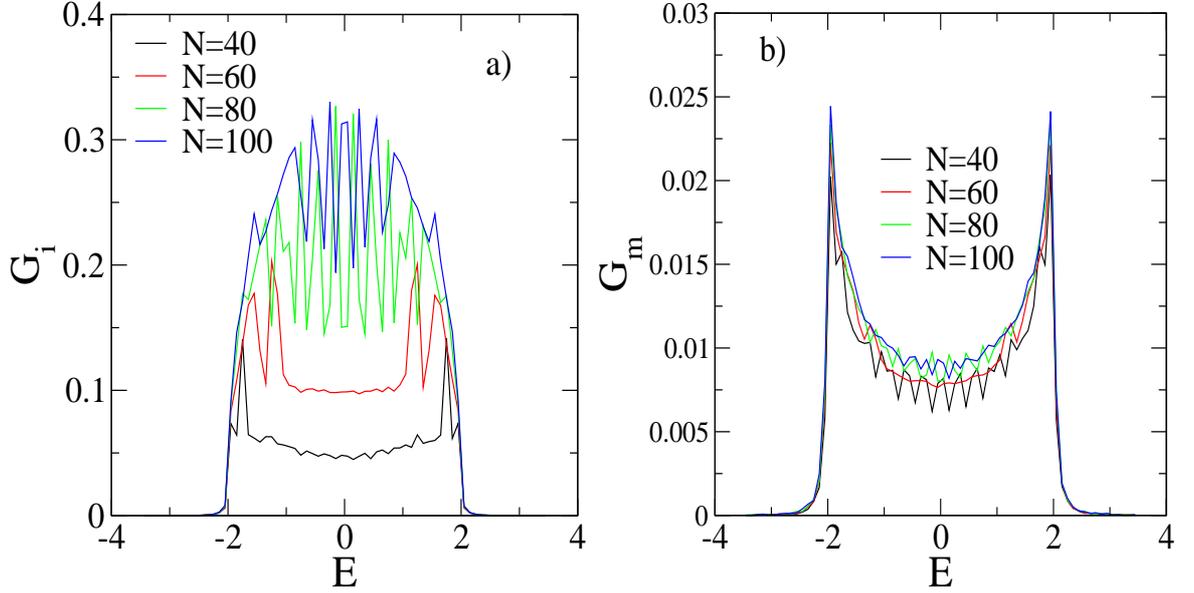


Figura 3.3: (a) condutância G_i na direção da diluição versus energia e (b) condutância G_m calculada na direção perpendicular. Condutância obtida através da fórmula de Kubo em sistemas com $N \times N = 40 \times 40$ até $N \times N = 100 \times 100$ sítios e $W = 5$. Em torno do centro da banda a condutância direção da diluição cresce com o tamanho do sistema sugerindo uma condutância macroscópica no limite termodinâmico. A condutância G_m permanece constante quando N cresce.

uma rede com 1000×1000 sítios, $W = 20$ e uma condição inicial tipo função delta ($c_{i,m} = \delta_{i,i_0} \delta_{m,m_0}$). Entretanto o sítio inicial (i_0, m_0) onde é localizado inicialmente o elétron foi escolhido de dois tipos: pertencente a rede diluída (chamado de tipo D) e pertencente a rede aleatório (chamado de tipo A). Recentemente foi mostrado que a dinâmica eletrônica em sistemas unidimensionais com desordem diluída é fortemente dependente da posição inicial do pacote eletrônico [81]. A fig. 3.4(a) apresenta o alargamento médio do pacote eletrônico na direção da diluição $\sigma_i(t)$ versus tempo calculado usando 4000×4000 sítios e $W = 5$. Observe que, mesmo para uma desordem intensa (maior que a largura da banda de estados permitidos em sistemas 2d) obtemos uma dinâmica super-difusiva na direção da diluição ($\sigma_i(t) \propto t^{0.75}$) independente da posição inicial do pacote eletrônico inicial. No caso da dinâmica partindo da rede desordenada (condição inicial tipo A) observamos que o coeficiente de difusão C_d (definido por $C_d = \sigma_i(t)/t^{0.75}$) é menor do que no caso da dinâmica partindo da rede diluída (condição inicial tipo D). Os estados estendidos presentes em modelos com desordem diluída são distribuídos na subrede diluída

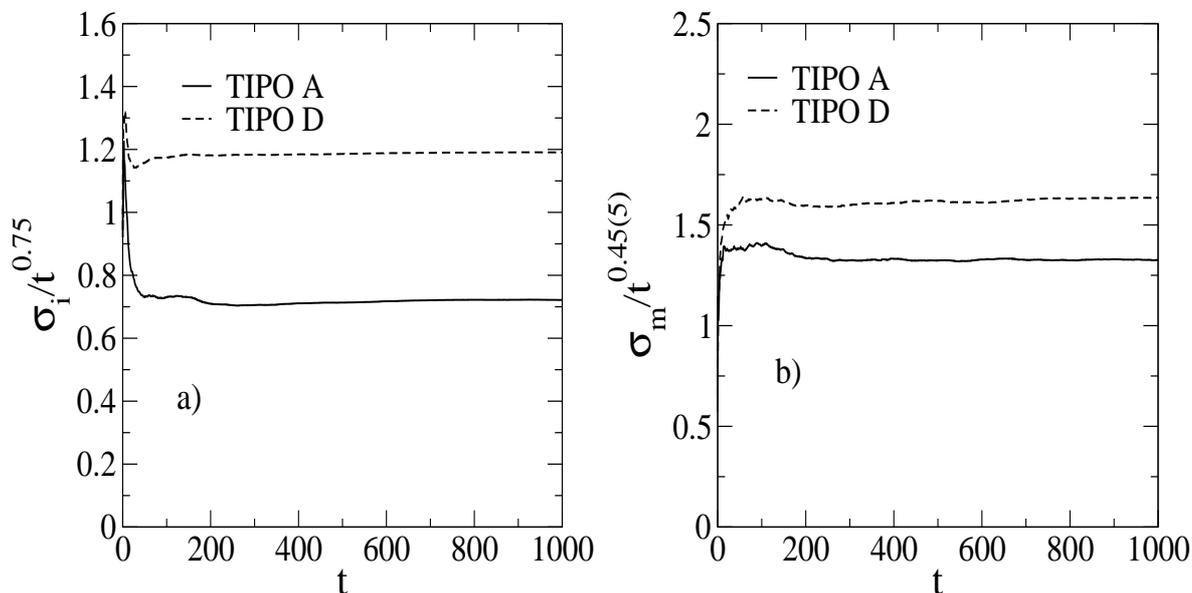


Figura 3.4: (a) Alargamento médio do pacote eletrônico na direção da diluição $\sigma_i(t)$ versus tempo. (b) Alargamento médio na direção perpendicular a diluição $\sigma_m(t)$ versus tempo. Nos dois casos utilizamos uma condição inicial tipo função delta ($c_{i,m} = \delta_{i,i_0} \delta_{m,m_0}$). O sítio inicial (i_0, m_0) foi escolhido de dois tipos: pertencente a rede diluída (chamado de tipo D) e pertencente a rede aleatória (chamado de tipo A).

tendo praticamente nenhuma componente na subrede desordenada. Portanto, a condição inicial totalmente localizada na sub-rede desordenada tem uma quantidade menor de modos estendidos, isto explica o coeficiente de difusão menor. Na fig.3.4(b) calculamos, usando o mesmo sistema do caso (a), o alargamento médio na direção perpendicular a diluição $\sigma_m(t)$. Observe que a dinâmica é muito mais lenta (abaixo do difusivo normal).

Realizamos também um estudo estatístico do espaçamento de níveis em sistemas bidimensionais com desordem diluída. A caracterização da estatística dos níveis em sistemas com desordem correlacionada consiste em um tema pouco explorado. Em particular, para sistemas com correlações locais na desordem como a diluição apresentada aqui, as propriedades espectrais são totalmente desconhecidas. Verificando o formalismo numérico utilizado neste trabalho, obtemos a estatística dos níveis para modelo de Anderson bidimensional com desordem não correlacionada, cujo resultado é conhecido. Para sistemas bidimensionais com desordem não correlacionada todos os auto-estados estão localizados e a distribuição dos espaçamentos de níveis é do tipo lei de Poisson $P(s) \propto \exp(-s)$ onde s é o espaçamento de níveis em unidades de espaçamento médio. A figura 3.5 mostra a

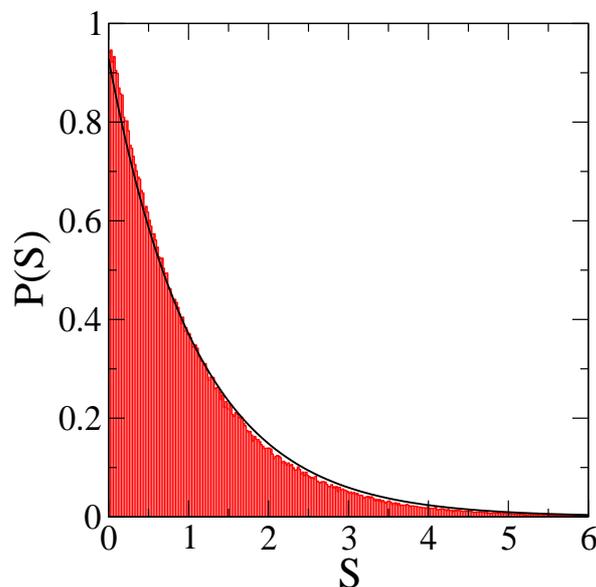


Figura 3.5: Distribuição dos espaçamentos para sistemas bidimensionais com desordem não correlacionada. Dados obtidos diagonalizando um hamiltoniano para um sistema com $N \times N = 100 \times 100 = 10000$ sítios e 1000 realizações de desordem distintas. Utilizamos uma janela de energia próxima do centro da banda $(-1, 1)$. Os resultados sugerem a usual Lei de Poisson $P(s) \propto \exp(-s)$.

usual Lei de Poisson $P(s) \propto \exp(-s)$ para sistemas bidimensionais com desordem não correlacionada. A distribuição dos espaçamentos de níveis foi obtida diagonalizando um hamiltoniano para um sistema com $N \times N = 100 \times 100 = 10000$ sítios e 1000 realizações de desordem distintas. Utilizamos uma janela de energia próxima do centro da banda $(-1, 1)$. Na figura 3.6 apresentamos os dados da distribuição dos espaçamentos de níveis para sistemas bidimensionais com desordem diluída. Aplicamos o procedimento de diagonalização numérica em sistemas com $N \times N = 100 \times 100 = 10000$ sítios, 1000 realizações de desordem distintas e $W = 5$ (fig. 3.6(a)) e $W = 10$ (fig. 3.6(b)). Novamente utilizamos uma janela de energia próxima do centro da banda $(-1, 1)$. Para o valor $W = 5$ obtemos aproximadamente a distribuição de Wigner, com um ajuste de curva $P(s) = a_0 s \exp(-a_1 s^{a_2})$. Os coeficientes para este ajuste são: $a_0 = 1.71, a_1 = 0.91, a_2 = 1.8$. Para a distribuição de Wigner teríamos $a_2 = 2$. Entretanto para $W = 10$ nossos resultados indicam um desvio da distribuição de Wigner. Para este nível de desordem apresentado na figura 3.6(b) nosso melhor ajuste foi $P(s) = b_0 s \exp(-b_1 s^{b_2})$, com coeficientes $b_0 = 2.27, b_1 = 1.28$ e $b_2 = 1.41$. Para desordem intensa ($W \rightarrow \infty$) a banda de

estados estendidos em torno do centro da banda desaparece. Em diversos sistemas com desordem correlacionada, foi mostrado que a banda de estados estendidos induzida por correlações na desordem é fortemente dependente da largura da distribuição de desordem. Portanto, quando $W \rightarrow \infty$, a distribuição da desordem parece convergir para a usual lei de Poisson.

A figura 3.7, reforça a conjectura de que o aumento na largura da distribuição da desordem faça com que a distribuição dos espaçamentos de níveis se torne uma distribuição do tipo lei de Poisson. Neste gráfico mostramos além das distribuições para $W = 5$ e $W = 10$, já comentadas, mostramos a curva para $W = 20$ que tem o mesmo ajuste $P(s) = c_0 s \exp(-c_1 s^{c_2})$. Para o caso $W = 20$, os coeficientes do ajuste são $c_0 = 3.49$, $c_1 = 1.83$ e $b_2 = 1.05$. Vemos com este gráfico que a medida que a largura da banda aumenta o expoente de s dentro da exponencial para cada ajuste, a_2, b_2 e c_2 diminui, parecendo convergir para uma lei tipo Poisson.

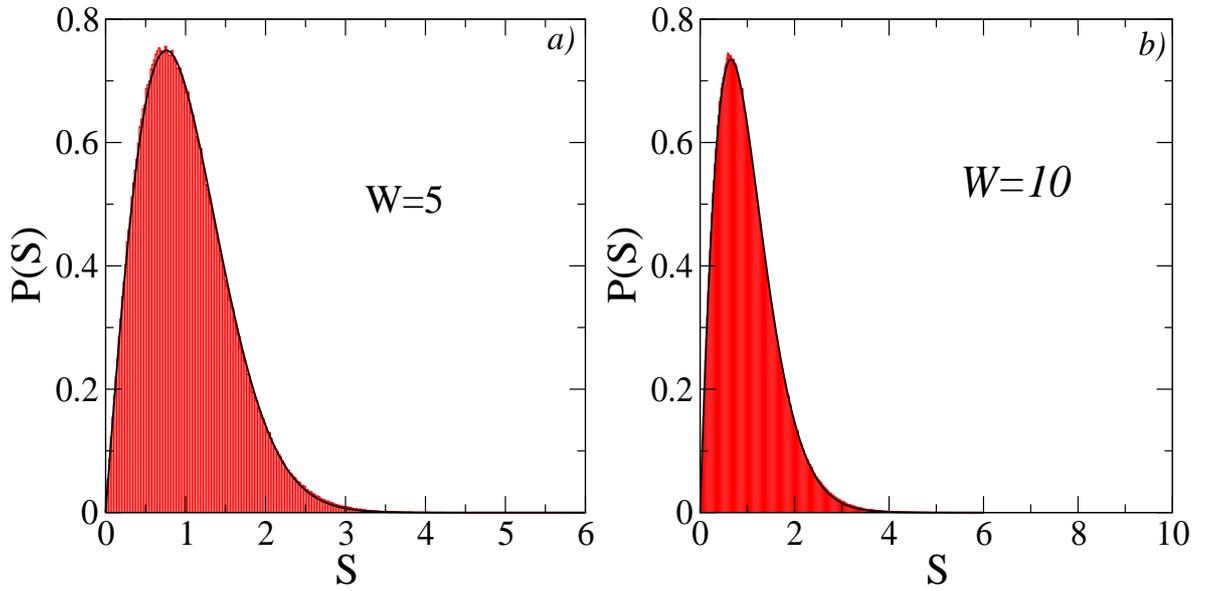


Figura 3.6: A distribuição dos espaçamentos de níveis para sistemas bidimensionais com desordem diluída. Dados obtidos através de diagonalização numérica em sistemas com $N \times N = 100 \times 100 = 10000$ sítios, 1000 realizações de desordem distintas e $W = 5$ (fig. 3.6(a)) e $W = 10$ (fig. 3.6(b)). Para grau de desordem intermediária $W = 5$ obtemos a distribuição de Wigner $P(s) \propto s \exp(-Cs^2)$. Quando W obtemos uma distribuição intermediária entre a Lei de Poisson e a Lei de Wigner $P(s) \propto s^2 \exp(-Cs^2)$. Nossos resultados sugerem que quando $W \rightarrow \infty$ a distribuição de desordem deve convergir para a usual lei de Poisson ou seja, o sistema se torna totalmente isolante.

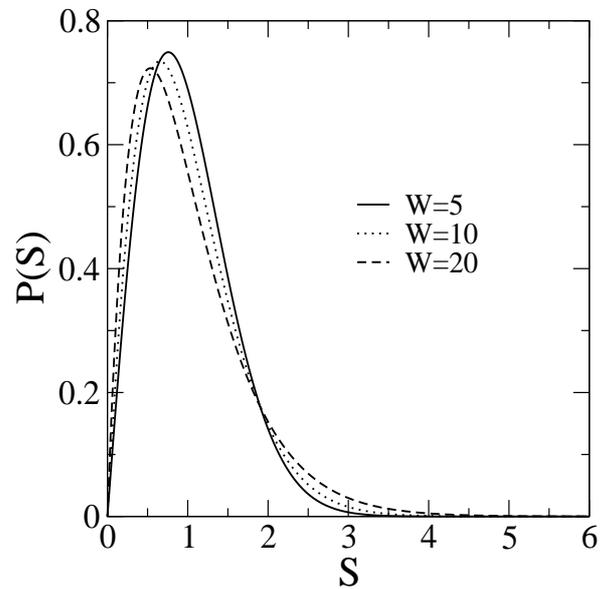


Figura 3.7: Distribuição dos espaçamentos dos níveis para o modelo de Anderson com desordem diluída. O gráfico mostra valores diferentes para a distribuição da desordem e seu respectivo ajuste segundo a equação $P(s) = A_0 s \exp(-A_1 s^{A_2})$. Para cada largura os coeficientes assumem valores diferentes no ajuste. Pelos gráficos e pelos valores dos coeficientes, a distribuição parece tender a uma lei do tipo Poisson, a medida que W cresce.

Capítulo 4

Conclusão

Nos últimos anos, muitos trabalhos vêm contrariando o estudo estabelecido por Anderson na década de cinquenta. O trabalho de Anderson mostrava que a natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade eram localizados. No modelo de Anderson os potenciais nos sítios eram potenciais aleatórios, e para um sistema tridimensional uma desordem fraca faria com que os estados fossem estendidos. Uma desordem forte ao contrário, faria com que os estados fossem localizados. Para um grau de localização intermediário, o sistema poderia apresentar uma transição metal-isolante. Com o passar do tempo, muitos trabalhos mostraram a violação da teoria de escala para a transição de Anderson. A incorporação de correlações na distribuição da desordem foi capaz de gerar estados estendidos em sistemas unidimensionais. Estes estudos tem se mostrado de grande valia no entendimento das propriedades de transporte em materiais amorfos. Os trabalhos teóricos nesta área vêm sendo confirmados por trabalhos experimentais, o que tem contribuído para consolidação dos resultados teóricos e aumentando a aplicabilidade prática dos resultados obtidos. Efeitos de caráter não-linear também vêm sendo amplamente considerados. Não-linearidade é outro ingrediente importante a ser considerado no estudo de materiais, pois incorpora a modelagem do sistema, interações reais. A interação elétron-fônon, que resulta em um termo não-linear na equação dinâmica do sistema, representa a influência direta das vibrações da rede na dinâmica do pacote de onda eletrônico.

Neste trabalho, apresentamos portanto dois problemas que trazem a desordem e a não-linearidade como fontes de localização da função de onda eletrônica, ambos os temas estão em evidência no âmbito científico.

No capítulo dois, trazemos um estudo da dinâmica de um pacote de onda eletrônico

em uma cadeia com interação elétron-fônon não-adiabática. A interação elétron-fônon foi levada em consideração na equação de Schrödinger dependente do tempo, com um tempo de retardo embutido no termo não-linear. No limite de um acoplamento adiabático, o fenômeno de auto-aprisionamento ocorre quando o parâmetro de não-linearidade ultrapassa um valor crítico da ordem da largura da banda. Consideramos então, o problema de um elétron se movendo em uma cadeia sob a influência de uma não-linearidade com um retardo, o qual efetivamente incorpora efeitos de uma interação elétron-fônon não-adiabática. No caso de um sistema que exhibe resposta instantânea à presença da não-linearidade, o sistema apresenta uma transição de estados estendidos para o regime de auto-aprisionamento. Para este caso o comprimento de não-linearidade crítica é tipicamente de $\chi = 3.5$. No entanto nós encontramos que para o caso de tempos longos de retardo, o auto-aprisionamento surge apenas para não-linearidades muito fortes. Como uma consequência, o transporte eletrônico retém sua característica metálica respondendo fracamente ao meio. De outro modo, nós reportamos que o ponto de transição para auto-aprisionamento em regime de resposta não-linear rápida tem um comportamento bem diferente, com auto-aprisionamento ocorrendo em valores mais baixos da não-linearidade crítica típica do meio de resposta instantânea. Para não-linearidades críticas finitas abaixo do valor crítico adiabático, um pequeno tempo de retardo pode promover a estabilização do auto-aprisionamento. Um segundo comportamento para a transição surge em tempos de atraso longos, acima dos quais o pacote e onda torna-se novamente deslocalizado. Os resultados deste trabalho estão publicados em uma importante revista de circulação internacional [102].

No capítulo três, estudamos um sistema bidimensional com desordem diluída, neste trabalho analisamos suas propriedades espectrais e de transporte. O sistema é composto de duas subredes, sendo uma pura e outra com potenciais aleatórios, constituindo potências de Anderson. O pacote de onda era inicialmente localizado, e sob estas condições foi resolvido numericamente a equação que descreve a dinâmica do sistema usando um método baseado na expansão de Taylor. Observamos com os resultados para a função participação na direção da diluição que, no centro da banda a função permanece constante independentemente do tamanho do sistema. O que sugere que nessa direção os estados são estendidos. Fora do centro da banda a participação já não é mais constante para cada tamanho N , o que sugere estados localizados. A condutância, na direção da diluição cresce com o tamanho do sistema, fato que está em concordância com os resultados obtidos para a participação na direção da diluição. Na outra direção, o valor da condutância é indiferente ao tamanho do sistema. Para estes dois resultados observamos

claramente que temos estados estendidos na direção da diluição no centro da banda. Na parte dinâmica foi observado que a condição inicial pode influenciar no espalhamento do pacote de onda. O coeficiente de difusão, é maior se o pacote de onda estiver inicialmente em um sítio da rede diluída.

Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
- [2] D. Hennig, G. P. Tsironis, Phys. Rep. **307**, 333 (1999)
- [3] F. M. Izrailev, Phys. Rep. **196**, 299 (1990).
- [4] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems* Cambridge University Press, 1993
- [5] F. L. Moore, J. C. Robinson, C. F. Bharucha, B. Sundaram, M. G. Raizen, Phys.Rev. Lett. **75**, 4598 (1995).
- [6] W. H. Oskay, D. A. Steck, V. Milner, B. G. Klappauf and M. G. Raizen, Optics Communications **179**, 137 (2000)
- [7] Fritz Haake, *Quantum signatures of Chaos*, Springer , Second Edition (2001)
- [8] S. Fishman, D. R. Grempel, and R. E. Prange, Phys. Rev. Lett.**49**, 509 (1982)
- [9] D. Hennig, G. P. Tsironis, Phys. Rep. **307**, 333 (1999).
- [10] V.M. Kenkre and D.K. Campbell, Phys. Rev. B **34**, 4959(1986).
- [11] P. N. Butcher and D. Cotter, The Elements of Nonlinear Optics (Cambridge University Press, 1991).
- [12] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Winston, Philadelphia 1976).
- [13] C. C. Tannoudji, B. Diu F. Laloë , *Quantum Mechanics* vol II (1977)
- [14] N.F Mott Rev. of Mod. Phys. **40**, 677(1968)
- [15] N. F. Mott, Phil. Mag. **17**, 1259 (1968)

-
- [16] N. F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor and Francis, London 1974)
- [17] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York 1983)
- [18] Kramer B and MacKinnon A 1993 Rep. Prog. Phys.**56** 1469 1993
- [19] F.J. Wegner, Z. Phys. B **36** 209 (1980)
- [20] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett., **81**, 3735 (1998)
- [21] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev.Lett. **42** 673(1979)
- [22] D. J. Thouless, Physics Reports **13**, 93 (1974)
- [23] K. Slevin, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **78**, 4083 1997
- [24] Y. Asada, K. Slevin e Tomi Ohtsuki, Phys. Rev. B **70**, 035115 (2004)
- [25] K. Slevin, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 1999
- [26] Kravchenko, et al., Phys. Rev. B **51**, 7038(1995)
- [27] Lee P A and Ramakrishnan T V 1985 Rev.Mod.Phys. **57** 287(1985)
- [28] S. Waffenschmidt, C. Pfeleiderer, e H.V. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **82** 3005 (1999)
- [29] S. Das Sarma, Song He and X.C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988)
- [30] M. Griniasty and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988)
- [31] J. Bellissard, D. Bessis, and P. Moussa, Phys. Rev. Lett. **49**, 701(1982)
- [32] D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988)
- [33] D.H. Dunlap, H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [34] H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991)
- [35] M. Paczuski, S. Maslov and P. Bak, Phys. Rev. E **53**, 414 (1996)
- [36] W.S. Liu, T. Chen and S.J. Xiong, J. Phys. Condens. Matter **11**, 6883 (1999)

- [37] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, M.L. Lyra and E.R. Raposo, *Europhys. Lett.* **66** 585 (2004).
- [38] I.F. dos Santos, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and M.D. Coutinho-Filho *J.Phys. Condens. Matter* **19** 476213 (2007).
- [39] U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. Krokhin, e H. J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 633 (2000).
- [40] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman, M. Segev, *Nature* **446**, 52 (2007).
- [41] S. M. Jensen, *IEEE J. Quant. Electron.* QE-18 1580 (1982).
- [42] P. N. Butcher and D. Cotter, *The Elements of Nonlinear Optics* (Cambridge University Press, 1991).
- [43] D. Hennig, G. P. Tsironis, *Phys. Rep.* **307**, 333 (1999).
- [44] M.I. Molina and G.P. Tsironis. *Physica D* **65** (1993).
- [45] D. Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.*, **81** 3108 (1998)
- [46] M. Hiller, *Parametric Bose-Hubbard Hamiltonians: Quantum Dissipation, Irreversibility, and Pumping*, Ph. D.'s Thesis (2007).
- [47] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307 (2001).
- [48] T. Holstein, *Ann. Phys. (N.Y.)* 8 (1959) 325.
- [49] M. Johansson, M. Hörnquist, and R. Riklund, *Phys. Rev.B* **52**, 231 (1995).
- [50] P.K. Datta and K. Kundu, *Phys. Rev. B* **53**, 14929(1996).
- [51] Z. Pan, S. Xiong, and C. Gong, *Phys. Rev. E* **56** 4744(1997).
- [52] M.V. Ivanchenko, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 175507 (2009).
- [53] S. Flach, D.O. Krimer, and Ch. Skokos, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 024101 (2009).
- [54] Ch. Skokos, D.O. Krimer, S. Komineas, and S. Flach, *Phys. Rev. E* **79**, 056211 (2009).

-
- [55] G. Sangiovanni, M. Capone, C. Castellani, and M. Grilli, Phys. Rev. Lett. **94**, 026401 (2005).
- [56] G. Kopidakis, S. Komineas, S. Flach, and S. Aubry, Phys. Rev. Lett. **100**, 084103 (2008).
- [57] A.S. Pikovsky and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **100**, 094101 (2008).
- [58] D. Hajnal and R. Schilling, Phys. Rev. Lett. **101**, 124101(2008).
- [59] Y. Lahini, A. Avidan, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D.N. Christodoulides, and Y. Silberberg, Phys. Rev. Lett. **100**, 013906 (2008).
- [60] A. Maluckov, Lj. Hadzievski, N. Lazarides, and G.P. Tsironis, Phys. Rev. E **79**, 025601(R) (2009).
- [61] V.M. Kenkre and H.-L. Wu, Phys. Rev. B **39**, 6907(1989).
- [62] P. Grigolini, H.-L. Wu, and V.M. Kenkre, Phys. Rev. B **40**, 7045 (1989).
- [63] D. Chen, M.I. Molina, and G.P. Tsironis, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 8689 (1993).
- [64] M. Albiez, Rudolf Gati, Jonas Fölling, Stefan Hunsmann, Matteo Cristiani and Markus K. Oberthaler, Phys. Rev. Lett. **95** 010402 (2005)
- [65] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni and S. R. Shenoy, Phys Rev. A **59** 620 (1999)
- [66] Mikrajuddin, K. Okuyama, and F.G. Shi, Phys. Rev. B **61**, 8224 (2000).
- [67] W. Zhang, A.O. Govorov, and S.E. Ulloa, Phys. Rev. B **66**, 060303(R) (2002).
- [68] M. Taniguchi and T. Kawai, Phys. Rev. E **72**, 061909 (2005).
- [69] E. Macia, Phys. Rev. B **76**, 245123 (2007).
- [70] H.N. Nazareno and P.E. de Brito, Phys. Rev. B **60**, 4629(1999).
- [71] F. Ishida and Y.E. Sawada, Phys. Rev. E **75**, 012901(2007).
- [72] R. Vicente, S. Tang, J. Mulet, C.R. Mirasso, and J.-M. Liu, Phys. Rev E **73**, 047201 (2006).

-
- [73] D.E. Katsanos, S.N. Evangelou, and S.J. Xiong, Phys.Rev. B **51**, 895 (1995).
- [74] M. Hilke, J. Phys. A **30**, L367 (1997)
- [75] E. Lazo, M. E. Onell, Physica B **299** (2000) 173.
- [76] F. Dominguez-Adame , I. Gomez , A. Avakyan , D. Sedrakyan , A. Sedrakyan, Physica Status Solidi B-Basic Research **221** (2): (2000) 633-639.
- [77] W. Deng, Physica B **279** (2000) 224-226.
- [78] E. Lazo, M. E. Onell, Phys. Lett. A **283** (2001) 376-381.
- [79] F. A. B. F. de Moura, M. N. B. dos Santos, U.L. Fulco, E.Lazo, M. Onell, M. L. Lyra, Eur. Phys. Jou. B **36**, 81 (2003).
- [80] M. Hilke, Phys. Rev. Lett. **91**, 226403 (2003).
- [81] S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and E. Lazo, Physics Letters A, **355**, 468 (2006).
- [82] E. Abrahams, S.V. Kravchenko and M.P. Sarachik, Reviews of Modern Physics, **73**, 251 (2001).
- [83] S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, Physica A **266**, 465 (2005).
- [84] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo and M.L. Lyra, Phys.Rev. B **68**, 012202 (2003).
- [85] P.K. Datta and K. Kundu, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4465 (1994).
- [86] R. Orbach, Philos Mag. B **65**, 289 (1992).
- [87] E. Abrahams, S.V. Kravchenko, and M. P. Sarachik, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001); V. M. Pudalov et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 126403 (2003)
- [88] E. P. Wigner, Ann. Math. **65**, 203 (1957).
- [89] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos*, Cambridge University Press, 1998.
- [90] A. Hoenig, D. Wintgen: Phys. Rev. A **39**, 5642 (1989)

- [91] Zimmermann, H. Köppel, L.S. Cederbaum, C. Persch, W. Demtroder, Phys. Rev. Lett. **61**, 3 (1988)
- [92] K. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos* Cambridge University Press, 1996.
- [93] B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56** 1469, (1993). For a review see, e.g., I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul and L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).
- [94] Wen-Sheng Liu, S. Y. Liu and X. L. Lei, Eur. Phys. J. B **33**, 293 (2003).
- [95] F.A.B.F. de Moura, L.P. Viana, M.L. Lyra, V.A. Malyshev, F. Dominguez-Adame, Phys. Lett. A **372** 6694 (2008)
- [96] Henrik Bruus and Karsten Flensberg, *Introduction to Many-body quantum theory in condensed matter physics*, University of Copenhagen 2002
- [97] Eleftherios N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, third edition, Springer Series in solid-state sciences (2005).
- [98] R. Kubo. J. Phys. Soc. Jpn., **12**, 570 (1957).
- [99] A. D. Greenwood. Proc. Phys. Soc., **71**, 585 (1958).
- [100] H. N. Nazareno, P. E. de Brito and E. S. Rodrigues, PRB **66**, 012205 (2002).
- [101] R. P. A. Lima, Heber R. da Cruz, J. C. Cressoni, and M. L. Lyra, Phys. Rev. B **69**, 165117 (2004).
- [102] F.A.B.F. de Moura, Iram Gléria, I.F. dos Santos, and M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **103**, 096401 (2009)