

TESE DE DOUTORADO

**Violação da Teoria de Escala em Sistemas  
Unidimensionais com Desordem Diluída e  
Sistemas com Acoplamentos de Longo-Alcance**

SAMUEL SILVA DE ALBUQUERQUE

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

Tese de Doutorado

**Violação da Teoria de Escala em Sistemas  
Unidimensionais com Desordem Diluída e  
Sistemas com Acoplamentos de Longo-Alcance**

SAMUEL SILVA DE ALBUQUERQUE

Tese de doutorado apresentada ao Instituto  
de Física da Universidade Federal de Alagoas  
como parte dos requisitos para obtenção do  
título de Doutor em Física

Orientador: Marcelo Leite Lyra

Co-orientador: Francisco A. B. F. de Moura

Maceió - Alagoas - Brasil

Dezembro - 2006



**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 : (082) 3214-1423/FAX (82) 3214-1645

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

*"Violação da Teoria de Escala em Sistemas Unidimensionais com Desordem Diluída e Sistemas com Acoplamentos de Longo-Alcance"*

por

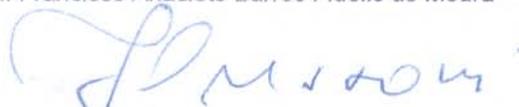
**Samuel Silva de Albuquerque**

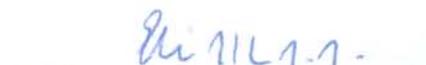
A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (Orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, José Carlos Cressoni, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Eudenilson Lins de Albuquerque, do Departamento de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte e Gil de Aquino Farias, do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, consideram o candidato aprovado com grau "A".

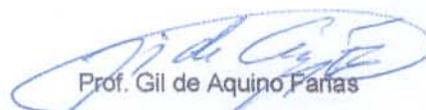
Maceió, 12 de dezembro de 2006

  
Prof. Marcelo Leite Lyra

  
Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

  
Prof. José Carlos Cressoni

  
Prof. Eudenilson Lins de Albuquerque

  
Prof. Gil de Aquino Farias

## AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar aos Professores Marcelo Lyra e Francisco Fidelis pelo acompanhamento e muita paciência durante todos os estágios desta tese de doutoramento, sem os quais não teria sido possível a produção da mesma.

Gostaria de agradecer também a todos os professores do Instituto de Física pela contribuição na minha vida acadêmica, em particular, àqueles com quem tive a oportunidade de ter feito algum curso.

Agradeço aos funcionários que também foram indispensáveis em muitos momentos deste curso de doutoramento.

Agradeço aos colegas de curso e aos amigos dos quais não citarei nomes para não ser injusto, pois tenho estima por todos sem exceção.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ), pelo apoio financeiro durante os anos que passei como aluno bolsista do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC).

Por fim, agradeço a CAPES por ter fornecido o suporte financeiro durante esses anos de doutoramento.

---

## RESUMO

Em sistemas eletrônicos tridimensionais com desordem descorrelacionada é possível ocorrer uma transição de metal-isolante, conhecida como transição de Anderson, onde os estados eletrônicos podem ser localizados ou estendidos dependendo do grau de desordem imposto ao sistema. Em sistemas de dimensionalidade baixa  $d \leq 2$ , sem correlações na desordem, a teoria de escala prevê que todos os estados são localizados para qualquer valor finito do grau de desordem. Entretanto, vários estudos recentes para sistemas de dimensões  $d = 1$  e  $d = 2$  foram feitos mostrando a presença de estados estendidos se a desordem for correlacionada ou o sistema possuir acoplamentos de longo-alcance. Neste trabalho, nós analisamos alguns sistemas desordenados uni-dimensionais que apresentam estados estendidos. Nós estudamos a dinâmica do pacote de onda eletrônico em um modelo de Anderson diluído em uma dimensão. A diluição é feita pela introdução de um sítio com potencial fixo entre cada dois sítios de uma cadeia desordenada. Este modelo apresenta estados estendidos em uma energia ressonante, além de uma sensibilidade às condições iniciais do pacote de onda eletrônico. Quando o elétron é inicialmente localizado em um sítio da rede pura o pacote de onda alarga mais rapidamente do que quando o pacote de onda é posto inicialmente num sítio da sub-rede de Anderson. Explorando o mapeamento exato dos modos vibracionais em cadeias harmônicas nos auto-estados eletrônicos de modelos *tight-binding*, nós estudamos a natureza das excitações coletivas em cadeias harmônicas diluídas com desordem nas massas. Este modelo apresenta um modo de vibração estendido em  $\omega_c$  com deslocamento nulo das massas da cadeia de Anderson. Para uma excitação inicial tipo impulso em um sítio puro, o alargamento do pulso de energia é super-difusivo tanto na cadeia totalmente desordenada quanto na cadeia com desordem diluída. Por outro lado, para excitação por deslocamento em um sítio da cadeia pura, o alargamento do pulso de energia é difusivo, contrastando com o alargamento sub-difusivo observado em

---

cadeias totalmente desordenadas. Por fim, nós estudamos o problema da percolação em cadeias unidimensionais com acoplamentos de longo-alcance cujas ligações são ativadas segundo a probabilidade  $p(r) = p/r^{1+\sigma}$ . Nós apresentamos o diagrama de fases para ambas as versões no intervalo  $0 < \sigma < 1$ . No caso da percolação clássica, exploramos as propriedades de escala da massa dos maiores *clusters* para fazer estimativas dos parâmetros críticos. Nós obtivemos que a densidade de ligações entre primeiros vizinhos crítica cresce em direção a  $p_c^C(\sigma = 1) = 1$ . Desta forma, quando a probabilidade de ativação das ligações decai de forma quadrática, o maior cluster permanece finito para qualquer diluição das ligações. A dimensão fractal  $D_f$  do cluster percolante foi obtida e apresenta dois regimes bem característicos para  $\sigma > 1/2$  e para  $\sigma < 1/2$ . No limite de  $\sigma = 0$  a dimensão fractal permanece finita, enquanto  $D_f = 1$  para  $\sigma = 1$ . Através da diagonalização exata do Hamiltoniano de cadeias finitas e fazendo uso da hipótese de escala por tamanho finito, nós investigamos a transição entre as fases localizada e estendida do modelo de percolação quântica no cluster infinito. Nossos resultados mostraram a existência de uma fase onde os estados eletrônicos são exponencialmente localizados, mesmo na presença de um cluster percolante, ou seja  $p_c^Q > p_c^C$ . Estados verdadeiramente estendidos surgem para  $\sigma < 0.78$ . Este valor é maior do que o valor limite obtido na literatura para a ocorrência de estados estendidos em modelos de Anderson em cadeias com acoplamentos de longo-alcance. Desta forma, não há uma correspondência direta entre as transições de Anderson e de percolação quântica em cadeias com acoplamentos cuja intensidade ou frequência decaem como uma lei de potência.

## ABSTRACT

In random non-interacting electron systems in three-dimensional lattices with uncorrelated disorder, it has been well established that there is a metal-insulator transition, usually named Anderson transition, in which the one-electron eigenstates change their nature from extended to localized as a function of the disorder strength. In low-dimensional systems with  $d \leq 2$ , the scaling theory of localization predicts complete localization for any strength of the disorder. In recent years, several studies in  $d = 1$  and  $d = 2$  have shown a violation of the scaling theory of localization if disorder has special correlations or the system presents long-range couplings. In this work, we analyze some one-dimensional systems that do present extended states. We study the one-electron wave-packet dynamics in the one-dimensional diluted Anderson model. The disorder is diluted by introducing between each pair of random sites a new site with fixed potential. This model presents extended states in particular resonant energies which leads to a very interesting phenomena of sensitivity to the initial condition of wave-packet spread. When the electron is initially localized in a diluting site, the wave-packet presents a faster spreading than that exhibited by a wave-packet initially localized in an Anderson site. Further, we explore the exact mapping between the one-electron eigen-states of tight-binding models onto the normal vibrational modes of harmonic chains to study the nature of collective excitations in harmonics chains with diluted disorder of the mass distribution. This model presents an extended harmonic state at  $\omega_c$  with null displacement at the random masses. For a initial pulse excitation, a super-diffusive energy spread is observed, similar to the one occurring in fully disordered chains. On the other hand, for an initial displacement excitation, the energy spreads diffusively, in contrast with the slower sub-diffusive spread in fully random chains. Finally, we study the classical and quantum percolation phenomena in power-law diluted chains for which the probability of occurrence of a bond between sites separated by a distance  $r$  decays

a  $p(r) = p/r^{1+\sigma}$ . We present the phase diagram for both classical and quantum models for the range of the decay exponent  $0 < \sigma < 1$ . In the case of classical percolation, we explore the scaling behavior of the mass of the largest clusters to obtain the critical parameters. We found that the critical percolation probability  $p$  grows continuously towards  $p_c(\sigma = 1) = 1$ . Therefore, for coupling probabilities decaying with the square of the distance, the largest cluster is finite for any degree of dilution. The fractal dimension of the percolating cluster was estimated and displays two distinct regimes for  $\sigma < 1/2$  and  $\sigma > 1/2$ . In the limit  $\sigma = 0$  the fractal dimension is finite and converges to  $D_f = 1$  for  $\sigma = 1$ . Performing an exact diagonalization of the Hamiltonian of finite chains and using the scaling hypothesis, we investigate also the quantum percolation transition in the spanning cluster. Our results show the existence of a phase at which the one-electron eigenstates remain exponentially localized which means that the critical percolation probability for quantum percolation is larger than that for classical percolation. Finally, we found that the phase of extended states appears for  $\sigma < 0.78$ . This limiting value is larger than the one reported in the literature for the emergence of extended states in Anderson models in chains with power-law decaying couplings. Therefore, the present results indicate that there is not a direct correspondence between the quantum percolation and Anderson transition in chains with long-range couplings.

# Sumário

Folha de rosto . . . . .	i
Agradecimentos . . . . .	ii
Resumo . . . . .	iii
Abstract . . . . .	v
<b>1 Introdução às propriedades de transporte eletrônico em sólidos</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução . . . . .	1
1.2 O modelo de Drude para metais . . . . .	6
1.3 Modelo de Sommerfeld para metais . . . . .	10
1.3.1 Propriedades do estado fundamental do gás de elétrons . . . . .	11
1.4 Funções de Bloch . . . . .	15
1.4.1 Superfície de Fermi . . . . .	16
1.5 O modelo <i>tight-binding</i> . . . . .	17
1.6 O modelo de Anderson . . . . .	19
1.7 Teoria de escala e a transição de Anderson . . . . .	23
1.8 Medidas do grau de localização . . . . .	33
1.9 Correlações no modelo de Anderson . . . . .	34
1.10 Acoplamentos de longo-alcance . . . . .	39
1.11 Excitações magnéticas e vibracionais em meios desordenados . . . . .	40
<b>2 Evolução temporal do pacote de onda no modelo de Anderson</b>	

<b>diluído</b>	<b>42</b>
2.1 O modelo de Anderson e a expansão do pacote de onda . . . . .	44
2.1.1 Comportamento de escala da função de onda e desvio quadrático médio . . . . .	45
2.1.2 Evolução do pacote de onda para uma cadeia periódica . . . .	46
2.2 Evolução do pacote de onda para o modelo de Anderson diluído . . .	48
<b>3 Modos vibracionais em cadeias harmônicas com desordem diluída</b>	<b>58</b>
3.1 Introdução . . . . .	58
3.2 A Matriz de transferência em uma dimensão e o expoente de Lyapunov	62
3.3 A densidade de estados . . . . .	64
3.4 Modos vibracionais em uma cadeia harmônica com desordem diluída .	65
3.5 Transporte de energia . . . . .	68
<b>4 Transição de percolação para cadeias unidimensionais, com ligação de longo-alcance para os casos clássico e quântico</b>	<b>72</b>
4.1 Percolação clássica . . . . .	75
4.1.1 Modelo de percolação clássica de longo-alcance e comporta- mento de escala fractal . . . . .	77
4.1.2 Análise de tamanho finito: diagrama de fases e dimensão fractal	81
4.2 Percolação quântica . . . . .	88
4.2.1 Densidade de estados . . . . .	91
4.2.2 Modelo da percolação quântica com ligações de longo-alcance em $1D$ . . . . .	92
4.2.3 Percolação quântica de longo-alcance e o comportamento de escala . . . . .	94
4.2.4 Diagrama de fases, dimensão fractal e densidade de estados . .	98
<b>5 Conclusões</b>	<b>104</b>

---

Referências	109
6 Artigos publicados	118

# Capítulo 1

## Introdução às propriedades de transporte eletrônico em sólidos

### 1.1 Introdução

A maioria dos modelos relacionados a sólidos é baseada em um arranjo estrutural ordenado. Porém, a maioria dos sólidos reais, sejam eles encontrados na natureza ou produzidos em laboratórios, não apresenta uma estrutura totalmente ordenada com simetria translacional e ordem de longo-alcance como um cristal perfeito. É importante conhecer a estrutura de tais sistemas para determinar suas propriedades químicas e físicas, tais como propriedades de transporte, propriedades de reflexão, propriedades de absorção, entre outras. A desordem em sólidos reais pode ser causada por impurezas, distorções na rede, deslocamentos na estrutura cristalina de um sólido, etc.

As propriedades de transporte eletrônico em meio desordenado têm sido amplamente estudadas depois que P.W. Anderson, por volta de 1958, mostrou que não há transporte se a intensidade da desordem for suficientemente grande [1]. As

funções de onda, neste caso, ficam restritas a uma região finita do espaço, dando origem a um estado ao qual chamamos de estado localizado, ou seja, o sistema torna-se um isolante. No entanto, se a largura da desordem for menor que um certo valor crítico  $W_c$ , o sistema apresenta características diferentes do caso anterior. Neste último caso, há o aparecimento de estados estendidos em uma faixa de energias em torno do centro da banda, separando assim duas faixas de energias com estados localizados, nas proximidades dos extremos da banda, de uma faixa de energias onde os estados são estendidos. As energias que separam as faixas de estados estendidos e localizados são usualmente chamadas de fronteiras de mobilidade (*mobility edges*) [2]. Quando a energia de Fermi  $\epsilon_F$  estiver em uma faixa de energias onde os estados são estendidos tem-se uma fase metálica, caso contrário o sistema é isolante. Dessa forma, é possível a ocorrência de uma transição metal-isolante em função do grau da desordem, conhecida como transição de Anderson. A hipótese de um único parâmetro de escala proposta por Abrahams e colaboradores [2] prevê que não deve haver uma transição de Anderson para sistemas de dimensionalidade  $d \leq 2$ . Contudo, vários modelos têm sido estudados recentemente, mostrando que pode haver uma transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada, acoplamentos de longo-alcance, ou ainda na presença de um campo magnético externo.

Basicamente, podemos citar como principais tipos de desordem: desordem topológica; desordem de spin; desordem substitucional e desordem vibracional. De uma forma sucinta, a desordem pode ser caracterizada por uma estrutura não cristalina, ou seja, uma estrutura em que os átomos ou grupo de átomos não estejam arranjados em uma estrutura padrão que se repete periodicamente em toda sua extensão, não possuindo assim uma ordem de longo-alcance.

A desordem topológica é aquela em que não há uma ordem ou periodicidade translacional como na figura 1.1. A desordem de spin é aquela em que a estrutura

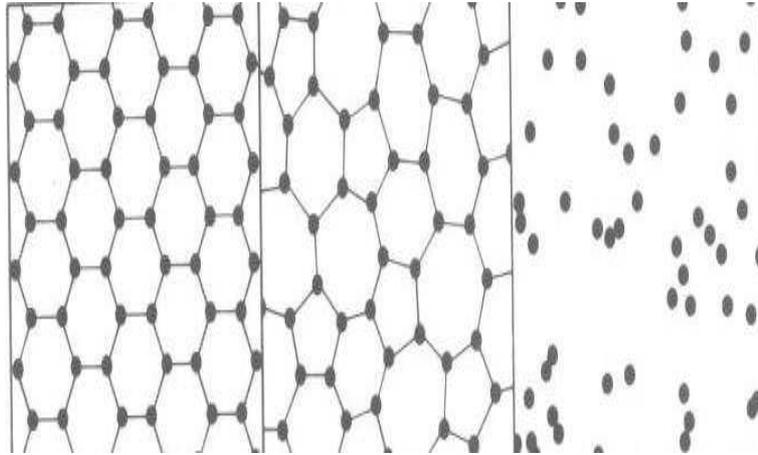


Figura 1.1: *Figura mostrando sólidos cristalinos, sólidos amorfos e líquido*

periódica é mantida, porém, os spins dos átomos ou sítios deste arranjo adquirem, em baixas temperaturas, orientações aleatórias como consequência de uma distribuição aleatória de acoplamentos. A desordem substitucional ocorre quando sítios de uma rede cristalina em posições aleatórias são substituídos por outros átomos ou grupo de átomos diferentes da rede cristalina original. É importante frisar que as definições de redes periódicas são feitas sempre à temperatura absoluta igual a zero. Assim, a uma temperatura  $T$  diferente de zero, os átomos encontram-se posições aleatórias em torno da posição de equilíbrio devido a agitação térmica, caracterizando a desordem vibracional.

Existem diversos fenômenos relacionados à existência de desordem em sólidos como vidros e outros materiais amorfos. Dentre eles, podemos citar fenômenos ópticos e fenômenos elétricos. Como exemplo de propriedades ópticas, os processos de reflexão (figura 1.2) e absorção possuem diferentes características em sólidos cristalinos ou sólidos amorfos. A figura 1.2 mostra a comparação entre o espectro de reflexão do Ge líquido, Ge cristalino e Ge amorfo, onde a estrutura apresentada pela curva do espectro cristalino é consequência da ordem de longo-alcance presente neste estado. O fato de um sólido amorfo não possuir qualquer direção preferencial

que possa ser associada com eixos cristalográficos, faz que estes compostos sejam opticamente isotrópicos. Outros tipos de absorção que são comumente observados em semicondutores amorfos são os processos de absorção iônica e luminescência, cujo espectro é resultante de transições que ocorrem em níveis eletrônicos de metais ou ions terras-raras que podem ser dissolvidos em matrizes vítreas de forma proposital ou não. Esses últimos processos são de extrema importância e seu interesse científico está relacionado ao fato de que tais processos de absorção podem ser usados como prova da estrutura local, uma vez que o espectro de absorção é modificado abruptamente com a mudança da configuração local. O interesse em se estudar propriedades de luminescência intra-iônica vem do potencial que vidros dopados com terras raras têm como materiais para a fabricação de lasers.

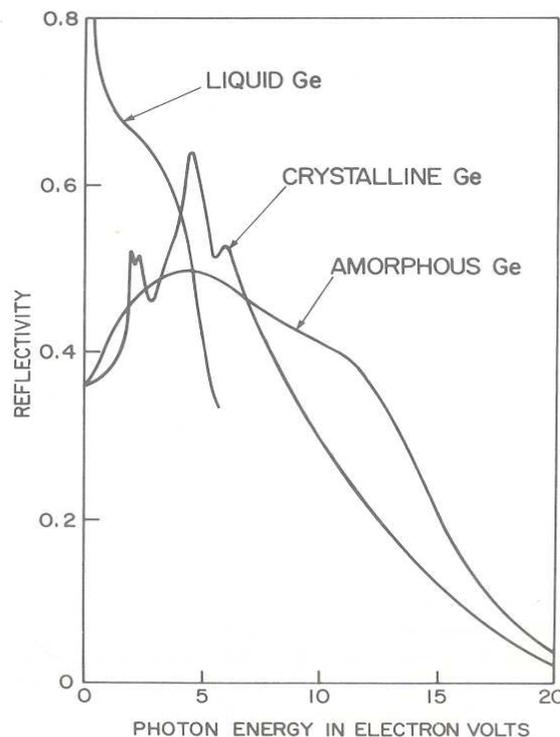


Figura 1.2: Reflexão em função da energia de fóton (em volts), no regime de excitação eletrônica (baixa frequência) do germânio cristalino, germânio amorfo e germânio líquido [3].

Os fenômenos de transporte eletrônicos em materiais amorfos têm sido amplamente estudados, tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental, uma vez que é indispensável o conhecimento das propriedades de condução eletrônica para a confecção de dispositivos de interesse tecnológico. O fenômeno da localização dos estados eletrônicos tem sido amplamente estudado em sólidos desordenados. A localização de excitações coletivas induzidas por desordem é bastante geral, como por exemplo a localização da luz, localização de ondas na água ou ondas elásticas em sólidos amorfos.

A maioria dos modelos teóricos, usando conceitos de física clássica e física quântica, consideram a desordem como uma perturbação de uma estrutura cristalina. Em tais modelos, as funções de onda se estendem por toda a cadeia como uma onda de Bloch, porém com um comprimento de coerência finito devido à desordem. Essa abordagem falha na presença de desordem forte, ou em sistemas de baixa dimensionalidade, devido ao fenômeno da localização. Faz-se necessário então desenvolver novos métodos e técnicas para se estudar especificamente o problema da localização de Anderson. Vários esforços têm sido empenhados na busca do entendimento desse fenômeno, tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental, tendo como ponto de partida o trabalho de P. W. Anderson de 1958, sobre as propriedades de transporte em sistemas desordenados. Em seu modelo, P. W. Anderson considerou a propagação eletrônica em um meio aleatório onde a interação coulombiana e correlações não são levadas em consideração [1, 2, 3, 4, 5]. A teoria de escala prevê que sistemas de dimensões 1D e 2D, apresentam funções de onda localizadas para qualquer valor da intensidade da desordem [2]. Várias técnicas analíticas e computacionais têm sido recentemente desenvolvidas para o estudo da transição de Anderson, tais como teoria de escala, teoria diagramática de perturbação, produto de matrizes aleatórias, métodos de diagonalização direta, etc. Na última década, ficou estabelecido que correlações na distribuição da desordem

podem modificar o cenário da localização de Anderson em baixas dimensionalidades.

Nesta tese, nós estudamos alguns problemas que apresentam uma violação da localização de Anderson em sistemas unidimensionais. Este trabalho está organizado da forma como segue: no restante deste capítulo, faremos uma revisão sobre as propriedades de transporte eletrônico em sólidos com ênfase na influência da desordem com o objetivo de estabelecer o contexto científico no qual a presente tese se insere. No capítulo 2, estudaremos a natureza dos estados eletrônicos em cadeias de Anderson diluídas compostas de duas cadeias inter-penetrantes onde uma dessas apresenta um potencial fixo e a outra apresenta um potencial aleatório. Verificamos a influência causada pela diluição da desordem na dinâmica de propagação da função de onda eletrônica. Investigamos o efeito de memória do sistema, analisando a possível dependência da dinâmica de propagação da função de onda eletrônica com a condição inicial. No capítulo 3, apresentamos também um modelo massa-mola, unidimensional com cadeias interpenetrantes, onde uma delas tem massas aleatórias e a outra possui uma massa fixa  $m_0$ . Neste problema, caracterizamos a dinâmica de propagação de ondas de deslocamento, verificando o caráter estendido e localizado dos modos de vibração na cadeia bem como o efeito de memória do sistema dependendo da excitação inicial. No capítulo 4, estudamos o problema da percolação, com ligações de longo-alcance, analisando os expoentes críticos bem como o diagrama de fases deste sistema, fazendo uma análise comparativa dos casos clássico e quântico. Por fim, no capítulo 5, faremos as considerações finais, resumindo as principais contribuições deste trabalho e discutindo as perspectivas de futuros desdobramentos.

## 1.2 O modelo de Drude para metais

Antes de descrever os principais modelos referentes à propagação eletrônica em sólidos amorfos, é importante descrever brevemente as principais propriedades dos metais. Os metais, sob condições de temperatura constante obedecem a lei de

Ohm de forma satisfatória. Tal lei pode ser expressa segundo a expressão que segue:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.1)$$

onde  $\mathbf{J}$  é a densidade de corrente elétrica,  $\sigma$  é a condutividade elétrica e  $\mathbf{E}$  é o campo elétrico. Os metais são bons condutores de corrente elétrica. A condutividade elétrica da maioria dos metais possui seus valores alcançando desde  $10^6$  a  $10^8 \text{ ohm}^{-1}\text{m}^{-1}$  em temperatura ambiente, enquanto que essa mesma grandeza em isolantes chega a ser da ordem de  $10^{-16} \text{ ohm}^{-1}\text{m}^{-1}$  a temperatura ambiente. Além de serem bons condutores elétricos, os metais também são bons condutores térmicos. Para temperaturas muito pequenas, sua condutividade térmica  $k_e$  independe da temperatura enquanto que a condutividade elétrica  $\sigma$  possui uma dependência com o inverso da temperatura. Em 1881, Lorentz verificou que a fração  $k_e/\sigma T$  independe da temperatura e por sua descoberta, tal fração é conhecida como número de Lorentz. Em temperaturas suficientemente baixas,  $\sigma$  satura em um determinado valor que depende das impurezas e imperfeições encontradas na rede. A resistividade elétrica, que é o inverso da condutividade elétrica possui, em geral, um comportamento aproximado pela lei de Matthiessen, onde a contribuição para a resistividade das impurezas e imperfeições da rede é a mesma para todas as temperaturas:

$$1/\sigma = 1/\sigma_{impuro} + 1/\sigma_{puro} \quad (1.2)$$

De uma forma geral, a resistividade elétrica dos metais é determinada pela colisão dos elétrons com os fônons da rede e por colisões com impurezas e imperfeições da rede. Efeitos magnéticos em metais ferromagnéticos e ligas metálicas também contribuem para a resistividade elétrica. Quase que 50% dos elementos metálicos são supercondutores em temperaturas suficientemente baixas.

As teorias e modelos propostos devem conter os principais ingredientes para

que essas propriedades, acima citadas, possam surgir de forma natural.

A descoberta do elétron por volta de 1897 por J. J. Thomson ocasionou um importante passo no estudo da estrutura da matéria e proporcionou a criação de teorias básicas para a condução eletrônica bem como a condução térmica em metais. Três anos mais tarde, Drude construiu sua teoria de condução de elétrons e condução de calor para metais, baseando-se na física clássica. Em seu modelo, Drude considerou que os elétrons de valência ou elétrons de condução, formavam na verdade um gás de elétrons livres, em meio aos caroços iônicos tomados como fixos em suas posições na rede. Dessa forma, a teoria cinética dos gases pode ser aplicada para os elétrons, supostamente livres, postos entre os caroços iônicos. Neste modelo, em sua forma mais simples, as moléculas são consideradas como esferas duras e idênticas, que se movem em linha reta, até encontrar outra molécula. O tempo de duração de cada colisão é considerado como desprezível e a força que atua nas moléculas ocorre apenas durante a colisão, não havendo qualquer outro tipo de interação entre elas.

Os elétrons de valência, são espalhados através das colisões aleatórias com os íons da rede, que são considerados imóveis. Aqui, o termo aleatório é usado para indicar que a velocidade média neste modelo é zero, imediatamente após o espalhamento por colisões com os caroços iônicos estáticos. Quando não há um campo externo aplicado ao sistema, os elétrons não possuem uma direção preferencial para se movimentar. Porém, quando um campo externo é aplicado ao sistema, o movimento dos elétrons passa a ter uma direção preferencial que é a direção do campo externo aplicado. Não são consideradas interações tipo elétron-elétron (*aproximação de elétrons independentes*), elétron-ion (*aproximação de elétrons livres*) e interações eletromagnéticas. Além disso, o mecanismo de colisão é bastante simplificado.

Algumas características físicas, como as densidades de partículas calculadas pelo modelo de Drude, não possuem uma boa precisão. Essas densidades, quando calculadas por esse modelo, são cerca de mil vezes menor do que seus valores reais,

em condições normais de temperatura e pressão. Porém, a resistência de um fio é proporcional ao potencial ao qual o fio é submetido  $V = IR$  onde  $V$  é o potencial eletrostático,  $I$  é a corrente que passa pelo fio e  $R$  é a sua resistência. A resistência do fio depende de suas dimensões e independe da corrente elétrica ou potencial ao qual o fio é submetido. O Modelo de Drude foi capaz de prever este comportamento e ainda deu uma estimativa do valor da resistência elétrica, mesmo com todas as simplificações citadas anteriormente como mostra a expressão a seguir:

$$R = \frac{\rho L}{A} \quad (1.3)$$

onde  $\rho$  é a resistividade elétrica,  $L$  o comprimento do fio e  $A$  a área da seção transversal do fio.

Um dos resultados mais expressivos da teoria de Drude está relacionado ao processo de condução térmica em metais através da lei empírica de Wiedemann e Frantz de 1853. A Lei de Wiedemann e Frantz estabelece que a razão entre a condutividade térmica e a condutividade elétrica,  $\kappa/\sigma$ , de uma grande parte dos metais, é linear com a temperatura e a constante de proporcionalidade é a mesma para a maioria dos metais. Este resultado, segundo a teoria de Drude, é expresso como:

$$\kappa/\sigma = \frac{3}{2} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (1.4)$$

onde como antes  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $e$  é a carga elementar do elétron e  $T$  é a temperatura, e a distribuição de velocidades de Maxwell Boltzmann para os elétrons foi considerada.

Rearrmando a última equação e substituindo os valores das constantes  $e$  e  $k_B$ , temos que:

$$\kappa/\sigma = 1.11 \times 10^{-13} \text{ Watt.ohm}/K^2 \quad (1.5)$$

que é metade do valor tipicamente encontrado. De fato, a teoria de Drude não está correta, uma vez que o resultado de Drude supõe que os elétrons obedecem às leis dos gases ideais clássicos, o que não é válido para um gás de elétrons.

Utilizando as propriedades de gás ideal clássico para os elétrons, Drude encontrou que o calor específico  $c_v$ , é dado por:

$$c_v = \frac{3}{2}nk_B \quad (1.6)$$

que está em total desacordo com os calores específicos encontrados para metais, onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $n$  é a densidade de elétrons por unidade de volume e  $T$  a temperatura.

Modelos mais elaborados, mais robustos e mais realísticos são estudados utilizando a teoria quântica dos sólidos. Nesses modelos, são acrescentados aspectos quânticos das partículas, bem como interações desprezadas no modelo de Drude para os metais.

### 1.3 Modelo de Somerfield para metais

O Modelo de Drude assume que os elétrons seguem uma distribuição para as velocidades típica de um gás ideal clássico ordinário, ou seja, segue a distribuição clássica de Maxwell-Boltzmann para velocidades que, a uma temperatura  $T$ , no equilíbrio termodinâmico é dada por:

$$f_{MB}(v) = n \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \quad (1.7)$$

onde  $n$  é o número de elétrons por unidade de volume,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $m$  é a massa do elétron e  $\mathbf{v}$  sua velocidade como definidos anteriormente. Esta quantidade, multiplicada por  $d\mathbf{v}$ , representa matematicamente o número de

elétrons por unidade de volume, com velocidade  $\mathbf{v}$ , num intervalo  $d\mathbf{v}$  em torno de  $\mathbf{v}$ . Vimos na seção anterior que esta expressão forneceu um bom resultado para a teoria de Wiedemann Frantz, porém, a contribuição para o calor específico dada por  $3/2nk_B$  não foi muito satisfatória, uma vez que este resultado não fora confirmado para os metais.

Tal problema foi resolvido com o surgimento da Teoria Quântica e, conseqüentemente, com o entendimento de que elétrons são férmions e satisfazem o princípio de exclusão de Pauli. Desta forma, é preciso substituir a distribuição de Maxwell-Boltzmann (caso clássico) pela distribuição de Fermi-Dirac (caso quântico) que é expressa como:

$$f_{FD}(\mathbf{v}) = \left( \frac{m^3}{4\pi^3 \hbar^3} \right) \frac{1}{\exp[(\frac{1}{2}mv^2 - k_B T_0)/k_B T] + 1} \quad (1.8)$$

Aqui,  $\hbar$  é a constante de Planck ( $h$ ) dividida por  $2\pi$ ,  $T_0$  é a temperatura de Fermi que é extraída da condição de normalização

$$n = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{v}) \quad (1.9)$$

As outras constantes  $m$  e  $k_B$  já foram definidas antes.

Sommerfeld utilizou o princípio de exclusão de Pauli e processos de contagem de estados eletrônicos, para resolver o problema que não fora resolvido antes por Drude, em sua teoria para o gás de elétrons livres em metais. O modelo de Sommerfeld é basicamente um modelo de Drude para o gás de elétrons livres, mas com um ingrediente novo que é a introdução dos efeitos quânticos através da distribuição de Fermi-Dirac no lugar da distribuição de Maxwell-Boltzmann.

### 1.3.1 Propriedades do estado fundamental do gás de elétrons

Podemos calcular as propriedades de estado fundamental de  $N$  elétrons, que estão confinados em uma caixa fechada de lados  $L$  e, conseqüentemente, de volume  $V = L^3$ . Como estamos supondo a *aproximação de elétrons independentes*, então precisamos calcular apenas os níveis de energia de um único elétron confinado na caixa e em seguida, preencher os níveis de energia, seguindo o princípio de Pauli, que permite que apenas um elétron ocupe cada um dos estados eletrônicos existentes.

Cada estado eletrônico pode ser descrito pela função de onda  $\psi(\mathbf{r})$ , com a especificação do estado de spin do elétron. Se os elétrons não estão interagindo entre si, então, a função de onda satisfaz a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

As condições periódicas de contorno da caixa, onde o elétron está confinado, são dadas pela equação:

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \quad (1.11)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z) \quad (1.12)$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \quad (1.13)$$

que são conhecidas como condições de contorno de Born-von Karman ou simplesmente condições periódicas de contorno, onde  $L$  é o comprimento da caixa. Não estamos levando em conta aqui os efeitos da superfície metálica explicitamente, apenas as propriedades típicas do volume (*bulk*). De uma forma geral, as propriedades do *bulk* não são afetadas pelas propriedades e configurações particulares da superfície.

A solução da equação 1.10, sem levar em consideração as condições periódicas de contorno, é dada por:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.14)$$

Poderíamos ainda ter imposto a condição de que a função de onda é nula nas paredes da caixa, mas não teria sido interessante neste ponto pois as soluções da equação de onda teriam sido soluções tipo ondas estacionárias, e estamos interessados em estudar as propriedades de transporte de carga e de energia. Logo, uma solução mais adequada deve envolver ondas viajantes que representam os fenômenos de transporte. As auto-energias são dadas por:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (1.15)$$

onde  $\mathbf{k}$  pode ser interpretado como o vetor de onda característico da partícula. Além disso, a solução é sujeita à condição de normalização

$$1 = \int d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (1.16)$$

Essa condição nada mais é do que a condição de que o elétron tem probabilidade 1 de estar dentro da caixa de volume  $V$ . Introduzindo as condições periódicas de Born-von Karman (equações 1.11, 1.12 e 1.13) em 1.14, temos que os valores de  $\mathbf{k}$  devem assumir valores discretos como segue:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, \quad (1.17)$$

para  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$  inteiros.

O espaço tridimensional formado pelos eixos cartesianos  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$  é conhecido como espaço- $k$  ou espaço recíproco e os valores permitidos dos vetores de

onda são múltiplos inteiros de  $2\pi/L$  como mostrado em 1.17. Como assumimos que os elétrons não interagem entre si, podemos construir o estado fundamental de  $N$ -elétrons, preenchendo os níveis de energia de um único elétron, seguindo o Princípio de Pauli. Os níveis eletrônicos são especificados pelos vetores de onda  $\mathbf{k}$  permitidos no espaço recíproco e a projeção do spin do elétron ao longo de um eixo arbitrário, podendo assumir os valores  $-\hbar/2$  e  $\hbar/2$ . Desta forma, para cada valor permitido de  $\mathbf{k}$ , existem dois níveis eletrônicos possíveis. Os níveis de energia são então preenchidos, desde o nível de menor energia ( $k = 0$ ,  $\epsilon = 0$ ) até o nível de maior energia que esteja preenchido, aqui indicado pelo vetor de onda  $k_F$  e chamado de nível de Fermi.

O número de estados eletrônicos, por unidade de volume pode ser calculado através da seguinte equação:

$$g(\epsilon)d\epsilon = g(\mathbf{k})d\mathbf{k} = (k/\pi)^2 dk \quad (1.18)$$

onde a função  $g$  é chamada de densidade de estados. Como o vetor de onda e a energia estão relacionados pela relação de dispersão (equação 1.15), temos que:

$$g(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad (1.19)$$

A discrepância entre o valor do calor específico calculado classicamente no modelo de Drude e os valores comumente encontrados relaciona-se ao fato de que nem todos os elétrons contidos no gás, aquecidos desde o zero absoluto, ganham energia proporcional a  $k_B T$ . Somente os elétrons em orbitais dentro de um intervalo  $k_B T$  em torno da energia de Fermi são excitados termicamente. Utilizando a estatística de Fermi-Dirac, um valor aproximado do calor específico eletrônico é dado por:

$$c = \frac{\pi^2 n k_B^2 T}{2\epsilon_F} \quad (1.20)$$

onde  $\epsilon_F$  é a energia de Fermi e  $n$  é a densidade eletrônica do gás.

O valor obtido para o calor específico eletrônico, segundo a teoria de Sommerfeld, dado pela equação anterior, difere do valor clássico por um fator  $\pi^2 k_B T / 3\epsilon_F$  e depende linearmente da temperatura.

## 1.4 Funções de Bloch

O problema de elétrons em um sólido é, em princípio, um problema de muitos corpos interagentes e de uma forma geral de difícil tratamento teórico, tornando-se praticamente impossível de ser resolvido de uma forma simples. Uma descrição mais completa desse problema deve levar em conta interações tipo elétron-elétron e elétron-íon, desprezadas nos modelos de Drude e Sommerfeld. Na aproximação de elétrons independentes, as interações são representadas por um potencial efetivo de um elétron  $U(\mathbf{r})$ . Considerando que os átomos, em estruturas cristalinas, possuem uma estrutura organizada, ou seja, uma rede ordenada e periódica, podemos supor que o potencial  $U(\mathbf{r})$  também é periódico e com a periodicidade da rede ou seja:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1.21)$$

onde  $\mathbf{R}$  é algum vetor da rede de Bravais

Desta forma, pode-se ignorar, neste ponto, qualquer complexidade que o potencial possa ter, devido a suas mútuas interações, tanto com outros elétrons como com os íons da rede e tentar resolver o problema levando em conta apenas a sua periodicidade. Apenas com essa consideração, podemos extrair uma série de conclusões interessantes.

Com a introdução do potencial periódico descrito pela equação 1.21, a equação de Schrödinger para um elétron assume a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \epsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (1.22)$$

O caso do elétron livre é um caso particular da equação 1.22 onde o potencial  $U$  é nulo, um tipo particular de potencial periódico.

Na aproximação de elétrons independentes, cada elétron é descrito por uma equação de Schrödinger com o potencial periódico  $U$ . Esses elétrons são chamados de elétrons de Bloch e esses possuem estados estacionários com várias consequências interessantes provenientes do potencial periódico.

As soluções da equação de Schrödinger são dadas por soluções tipo ondas planas com a periodicidade do potencial, como segue:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

onde

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.24)$$

para todo  $\mathbf{R}$  pertencente a rede de Bravais.

Os valores dos vetores de onda  $\mathbf{k}$  são determinados pelas condições de contorno apropriadas e impostas ao problema. As condições de contorno usadas neste modelo, são semelhantes às condições de contorno impostas ao problema do elétron em uma caixa no modelo de Sommerfeld, diferindo apenas pelo fato de que, neste modelo, o comprimento da caixa  $L$  é um múltiplo da constante de rede  $a$ . Essas condições restringem os valores de  $\mathbf{k}$  a certos valores discretos e reais. O modelo de Bloch introduz um vetor de onda  $\mathbf{k}$  que, por sua vez, segue regras gerais neste problema de elétrons em um potencial periódico, semelhantes àsquelas do problema de elétrons livres introduzido no modelo de Sommerfeld.

### 1.4.1 Superfície de Fermi

A superfície de Fermi pode ser definida através da construção do estado fundamental de  $N$  elétrons livres. Todos os níveis eletrônicos  $\mathbf{k}$ , com energia  $\epsilon(\mathbf{k}) =$

$\hbar^2 k^2/2m$  são ocupados com energias menores que  $\epsilon_F$ , onde  $\epsilon_F$  é chamado de nível de Fermi ou energia de Fermi, com  $\epsilon_F$  determinado pela condição de que o número de níveis de energia menores que  $\epsilon_F$  seja igual ao número de elétrons.

No caso dos elétrons de Bloch, a forma para a construção do nível de Fermi é semelhante, com a diferença que  $\epsilon(\mathbf{k})$  não tem mais a forma simples obtida no modelo de Sommerfeld para os elétrons livres e  $\mathbf{k}$  deve ser restrito a uma célula primitiva para garantir que cada nível seja contado uma única vez.

Com a presença de um potencial não nulo, é importante introduzir o conceito de bandas de energia, que representam as faixas de energias permitidas aos elétrons, obtidas através da relação de dispersão  $\epsilon(\mathbf{k})$ . Neste contexto, as faixas de energias proibidas, para as quais não há estados eletrônicos permitidos, são denominadas de *gaps de energia*. As superfícies que separam os níveis de energias ocupados dos níveis de energias não ocupados são chamadas de superfícies de Fermi e são indicadas por:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_F \quad (1.25)$$

onde  $\epsilon_F$  é o nível de Fermi. A superfície de Fermi é uma superfície de energia constante assim como acontece com as superfícies equipotenciais na teoria eletromagnética.

## 1.5 O modelo *tight-binding*

Nas seções anteriores, os níveis eletrônicos em um metal foram calculados levando-se em conta que os elétrons de condução no metal formam um gás de elétrons aproximadamente livres e perturbados por um potencial periódico  $U(\mathbf{r})$  dos íons da rede.

O problema dos níveis eletrônicos em um sólido pode ser visto de um outro ponto de vista, considerando que o sólido (metal ou isolante) é uma coleção de átomos neutros, que interagem de forma fraca. Desta forma, os níveis eletrônicos estariam localizados em torno dos sítios da rede. Assim, a descrição dos níveis eletrônicos do arranjo de átomos deve ser mudada para níveis eletrônicos de cada átomo isolado. Essa aproximação pode ser feita caso a constante de rede seja suficientemente grande em relação ao alcance da função de onda.

O modelo *tight-binding* considera que a superposição das funções de onda atômicas são suficientemente pequenas para que a descrição atômica dos níveis seja adequada. Além disso, o Hamiltoniano periódico total  $H$ , em um dado sítio da rede, pode ser aproximado por um Hamiltoniano de um átomo isolado  $H_{at}$ , localizado naquele sítio. Os níveis eletrônicos ligados de  $H_{at}$  são localizados em torno do átomo e dados por  $\psi_n(\mathbf{r})$  que por sua vez são auto-estados do Hamiltoniano atômico segundo a equação a seguir:

$$H_{at}\psi_n = E_n\psi_n \quad (1.26)$$

onde  $E_n$  são as auto-energias.

De uma outra forma, a função de onda é pequena quando a distância é da ordem da constante de rede. Quando o Hamiltoniano cristalino  $H$  começa a diferir do Hamiltoniano atômico  $H_{at}$ , podemos ainda supor que  $\psi_n(\mathbf{r})$  é solução aproximada do estado estacionário para o Hamiltoniano com auto-valores  $E_n$ . Além disso,  $\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})$  também é solução, devido a periodicidade do Hamiltoniano, onde  $\mathbf{R}$  é um vetor da rede de Bravais.

Para encontrar as correções, podemos reescrever o Hamiltoniano total como:

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}) \quad (1.27)$$

onde  $\Delta U(\mathbf{r})$  contém todas as correções para o potencial atômico de forma a produzir

o potencial periódico do cristal.

Como estamos supondo que a influência de um átomo em relação a outro é praticamente nula, ou seja, a aproximação do orbital molecular (*tight-binding*), podemos então aproximar a função de onda do elétron no cristal inteiro como:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (1.28)$$

onde a soma é feita sobre todos os pontos da rede cristalina e  $\mathbf{k}$  estende-se por todos os  $N$  valores permitidos na primeira zona de Brillouin, de acordo com as condições periódicas de contorno de Born-von Karman. Neste ponto assumimos que cada base primitiva contém apenas um átomo. Além disso, a equação anterior possui a forma de Bloch, o que não é uma tarefa difícil de ser mostrada.

Quando um elétron transita por uma rede cristalina periódica, sua função de onda se estende por toda a cadeia fazendo com que o elétron possa se deslocar sem que o material possa oferecer qualquer resistência e assim chamamos essa função de onda estendida de função de Bloch.

## 1.6 O modelo de Anderson

A maior parte dos modelos referentes a sólidos leva em conta que os mesmos possuem uma estrutura ordenada dos átomos e que possuem uma estrutura periódica perfeita. Porém, todos os materiais, estejam eles na natureza ou sejam fabricados em laboratório, possuem algum tipo de desordem, seja ela pela presença de átomos diferentes dos átomos da rede principal, ou até mesmo uma distorção.

O problema da localização dos estados quânticos tem atraído muita atenção nas últimas décadas na tentativa de explicar as propriedades de transporte em um sólido amorfo. O modelo básico para o estudo dessas propriedades é o modelo sobre as propriedades de transporte em certas cadeias desordenadas proposto por

Anderson. A partir deste modelo, foi possível iniciar um estudo mais profundo sobre os estados eletrônicos de sólidos amorfos, ou seja sólidos que não possuem a periodicidade na rede, como no caso dos modelos de Drude, Somerfeld e Bloch discutidos em seções anteriores.

O Hamiltoniano no modelo de Anderson possui um termo cinético, introduzido pelo termo de *hopping* entre os sítios vizinhos da rede, na presença de um potencial aleatório. O Hamiltoniano *tight-binding* é escrito como:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_i t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (1.29)$$

onde  $\epsilon_i$  representa o potencial aleatório,  $t_{ij}$  o termo de *hopping* responsável pela parte cinética e representa a interação entre os sítios  $i$  e  $j$  e  $|i\rangle$  é o orbital atômico centrado no sítio  $i$ . As energias  $\epsilon_i$  possuem valores aleatórios num intervalo de largura  $W$  e o termo de *hopping*  $t_{ij}$  diminui rapidamente com a distância entre os sítios  $|i - j|$ . A largura  $W$  é chamada de força ou intensidade da desordem e este termo controla a transição metal-isolante. Anderson mostrou que dependendo da intensidade de desordem no sistema, pode haver ou não transporte eletrônico. Essa transição é controlada por um valor de  $W$  chamado de valor crítico e indicado por  $W_c$ . Para um modelo tridimensional, se  $W > W_c$  não há transmissão, caso contrário transmissão é possível dependendo da posição da energia de Fermi.

Os auto-estados e as auto-energias do Hamiltoniano 1.29 são calculados através da equação de auto-valores dada por:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.30)$$

É possível escrever as soluções para os estados estacionários na forma de

combinações lineares dos orbitais atômicos  $|i\rangle$  dada por:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \quad (1.31)$$

onde os auto-estados  $|i\rangle$  formam uma base ortogonal para o espaço das soluções do Hamiltoniano dado por 1.29 e  $|c_i|^2$  representa a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron no sítio  $i$ .

Introduzindo a equação 1.31 e o Hamiltoniano 1.29 na equação de auto-valor 1.30, temos que a equação de Schrödinger fornece as relações entre as amplitudes de probabilidades dadas por:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j \quad (1.32)$$

Simplificando a equação anterior, podemos considerar que o termo de *hopping* seja constante e os termos não-nulos são apenas entre os primeiros vizinhos. Desta forma podemos escrever:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{\{j\}} c_{j+i} \quad (1.33)$$

onde a soma em  $j$  é feita sobre os primeiros vizinhos e  $t$  tem unidade de energia.

Os casos cristalinos estudados anteriormente no modelo de Bloch podem ser obtidos da última equação fazendo algumas simplificações. Para o caso do modelo de Bloch em uma rede unidimensional cristalina, podemos considerar que  $W = 0$ , ou seja, não há desordem. Assim, todas as energias  $\epsilon_i$  são constantes e iguais a  $\epsilon_0$ , ou seja:

$$\epsilon_i = \epsilon_0, i = 1, 2, 3, \dots \quad (1.34)$$

Para uma cadeia linear onde os termos de *hopping* são constantes e diferentes

de zero apenas para os primeiros vizinhos, temos que

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=i-1, i+1} c_j \quad (1.35)$$

Substituindo 1.34 em 1.35, temos que:

$$(E - \epsilon_0)c_i = t(c_{i-1} + c_{i+1}) \quad (1.36)$$

As soluções tipo ondas de Bloch podem ser usadas como solução da equação anterior. Desta forma, tomando  $c_n = c_0 e^{ikn}$  e substituindo em 1.36, temos que:

$$E = \epsilon_0 + 2t \cos(k) \quad (1.37)$$

que é a relação de dispersão obtida para o modelo de Bloch unidimensional com potencial constante em cada sítio da rede e dado por  $\epsilon_0$ . A banda de energias permitidas neste caso é dada por:

$$\epsilon_0 - 2t < E < \epsilon_0 + 2t \quad (1.38)$$

Anderson estudou o caso mais geral em seu modelo, tomando  $W$  e  $t$  diferentes de zero, o que torna o problema muito mais complicado. Ele resolveu esse problema utilizando técnicas matemáticas sofisticadas como teoria de perturbação, tendo como termos perturbativos  $W$  e  $t$ , operadores de Green, técnicas da função de Green e técnicas de perturbação diagramática. Ele mostrou que se um sólido possui uma estrutura ordenada, então todos os estados eletrônicos deste sólidos são estendidos por toda a cadeia como uma onda de Bloch. Havendo algum tipo de desordem, seja ela estrutural, posicional ou de qualquer outra natureza, pode haver ou não transmissão da função de onda, dependendo da quantidade de desordem existente no sólido. A localização da função de onda da partícula ocorre devido às interferências

destrutivas sofridas pela mesma ao passar pelas barreiras aleatórias decorrentes do potencial aleatório.

O modelo de Anderson tem sido uma alavanca para muitos trabalhos relacionados às propriedades de transporte eletrônico. Várias versões de seu modelo têm sido propostas e apresentado muitas características interessantes. A quantidade de trabalhos nessa área tem crescido bastante devido a disponibilidade de muitos métodos teóricos e computacionais, além das técnicas experimentais que surgiram decorrentes das técnicas sofisticadas utilizadas na fabricação de equipamentos micro-eletrônicos, sendo assim utilizados para comprovar a veracidade das técnicas e modelos teóricos.

## 1.7 Teoria de escala e a transição de Anderson

O trabalho pioneiro relacionando a desordem à localização eletrônica foi publicado por P. W. Anderson em 1958. Anderson foi o primeiro a quantificar a quantidade de desordem necessária para a ausência de transportes em sistemas aleatórios [1]. Posteriormente, Mott em 1968 estudou a relevância das propriedades de transporte em materiais amorfos e definiu o conceito de *mobility edge* que representa a energia que separa estados eletrônicos estendidos de estados eletrônicos localizados [6]. Em  $T = 0$ , e numa aproximação onde são desprezadas as possíveis oscilações, que eventualmente podem ocorrer na rede, o *mobility edge* é a energia crítica que caracteriza a transição do estado metálico para o estado isolante. Essa transição é chamada de transição metal-isolante (MIT) induzida por desordem, ou transição de Anderson.

Várias técnicas têm sido desenvolvidas em função da elucidação da transição metal-isolante e uma delas foi proposta por Abrahams e colaboradores, exprimindo a dependência da transição de Anderson com o tamanho do sistema. O escopo desta teoria é baseado na hipótese de que existe uma quantidade única capaz de

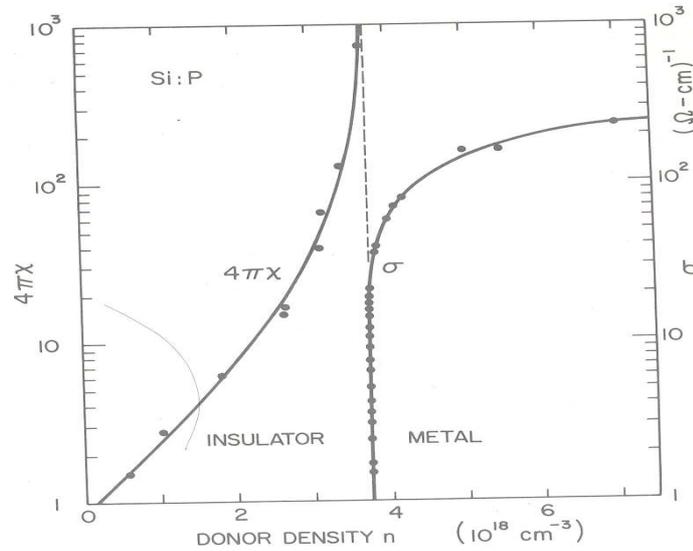


Figura 1.3: *Divergência da susceptibilidade  $4\pi\chi$  quando a transição se aproxima do lado isolante e a condutividade  $\sigma(n)$  quando aproxima-se da densidade crítica. Resultado experimental exprimindo a transição metal-isolante em silício dopado com fósforo a baixas temperaturas ( $T \sim 10^{-2}K$ ), feito por Hess, DeConde, Rosenbaum e Thomas(1982). [3]*

controlar a transição metal-isolante. Esta quantidade é chamada de condutância generalizada. Precisamos definir algumas variáveis antes de iniciar a teoria de escala para a transição de Anderson. Considerando um sólido de  $d$  dimensões, temos que o volume total é construído por várias caixas de volume  $L^d$ , onde  $L$  é a dimensão lateral de cada caixa.  $E_c$  é a energia crítica que define o *mobility edge*,  $W$  é, como antes, a largura da desordem,  $z$  o número de vizinhos,  $B = 2zt$  é a largura da banda de energia.

A localização eletrônica induzida por desordem proposta por Anderson, pode ser mostrada experimentalmente através de materiais amorfos como silício cristalino dopado de forma controlada com impurezas de fósforo (figura 1.3). A condutância  $\sigma$  pode ser fitada por  $\sigma \sim (n - n_c)^{0.5}$  para  $n > n_c$  e  $\chi \sim (n_c - n)^{-1.2}$  para  $n < n_c$ . Além disso, este experimento foi capaz de mostrar as características de escala da transição.

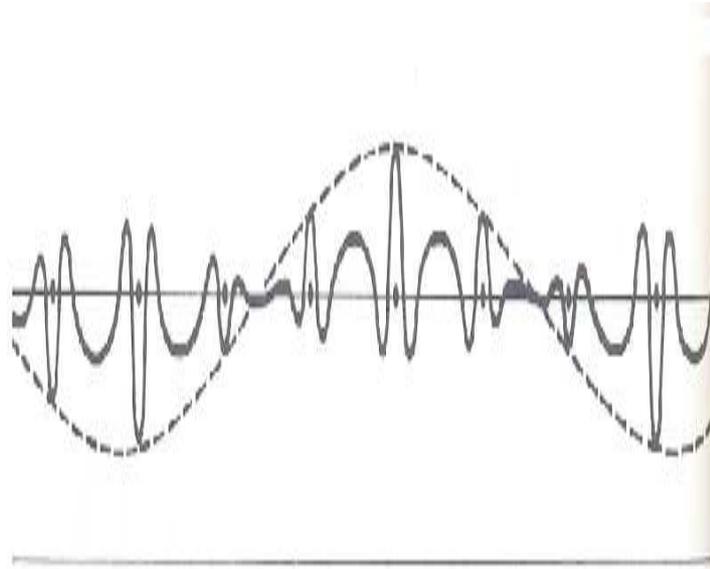


Figura 1.4: *Função de onda de Bloch representativa de um estado estendido [3].*

A figura 1.3 apresenta transições de Anderson [1] e de Mott [6]. A primeira causada pela introdução dos dopantes  $P$  (desordem) de forma controlada no silicene cristalino e a segunda causada pela correlação elétron-elétron. Porém, a transição metal-isolante que ocorre comumente na maioria dos sólidos amorfos é a transição de Anderson e portanto será a transição abordada nesta seção. Esse resultado experimental mostra também a assinatura de uma transição de fase de segunda ordem através do comportamento das funções  $\sigma$  e  $\chi$  na região crítica, ou seja, para  $n$  próximo de  $n_c$ .

As impurezas em um sólido induzem o aparecimento de estados ligados nas proximidades de alguns átomos fazendo assim com que, diferentemente do caso de Bloch (figura 1.4), a função de onda apresente uma amplitude insignificante em outras regiões do sólido que não seja na vizinhança desses átomos. Fora da região onde estão localizados esses estados ligados, a amplitude decai exponencialmente como  $e^{-\alpha R}$ , onde  $\alpha$  é chamado de inverso do comprimento de localização e  $R$  é a distância representada na figura 1.5.

As funções, de uma forma geral, apresentam algumas características de escala nas proximidades da região crítica como foi o caso do experimento exibido na figura 1.3. A teoria de escala, proposta por Abrahams e colaboradores inclui uma reformulação no modelo de Anderson onde no lugar de um sítio, temos caixas de volume  $L^d$  que contém vários sítios, onde  $d$  é uma dimensão arbitrária. Essas caixas são interligadas umas as outras para formar o sólido.  $W$  e  $t$ , definidos no modelo Anderson, são substituídos por energias características relacionadas à desordem e ao acomplamento eletrônico entre as caixas.

Em lugar de  $W$ , utiliza-se  $\Delta E$ , que é o espaçamento médio entre os níveis de energia, dentro de cada bloco de volume  $L^d$ . A densidade de estados  $n(E)$  é dada em termos dessas quantidades por:

$$n(E) = 1/(L^d \Delta E) \quad (1.39)$$

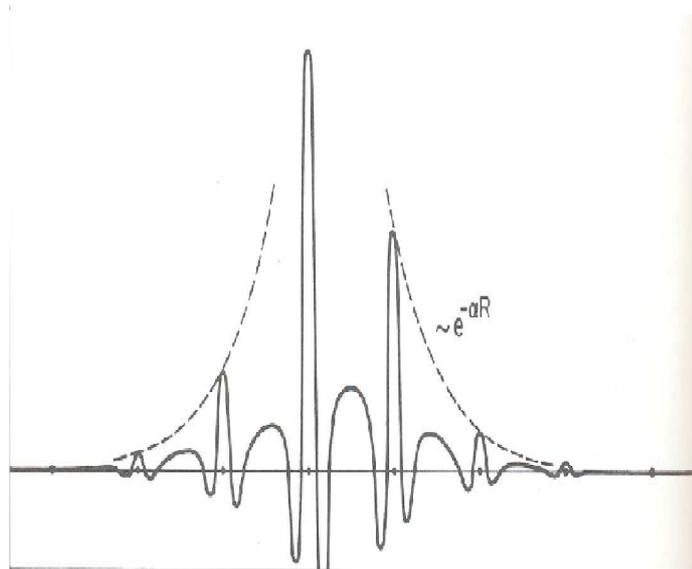


Figura 1.5: *Função de onda localizada de Anderson de estados eletrônicos localizados em torno de impurezas. A amplitude decai exponencialmente com a distância do centro de localização [3].*

Em substituição ao termo de *hopping*  $t_{ij}$ , que é o acoplamento entre os sítios  $i$  e  $j$ , define-se a energia  $\delta E$  que representa a variação de energia causada pela mudança nas condições de contorno nas paredes de caixas vizinhas. O princípio de incerteza de Heisenberg pode ser usado neste ponto para relacionar a variação de energia causada por mudanças nas condições de contorno  $\delta E$  e o tempo  $t_D$  necessário para o pacote de onda difundir até os contornos da caixa de lado  $L$ , assim:

$$\delta E \cdot t_D = \hbar \quad (1.40)$$

Através da relação de Einstein para a condutividade  $\sigma$  e as propriedades de difusão, temos:

$$\sigma = e^2 D n(E) \quad (1.41)$$

Supondo que o elétron difunde perfazendo uma caminhada aleatória ou movimento Browniano, temos a seguinte relação:

$$t_D = \frac{L^2}{D} \quad (1.42)$$

O parâmetro de desordem que é denotado por  $g^{-1}$ , é dependente da escala e é expresso por:

$$\frac{1}{g(L)} = \frac{\Delta E(L)}{\delta E(L)} \quad (1.43)$$

O parâmetro  $1/g(L)$  na equação 1.43 pode ser interpretado como sendo um parâmetro sem dimensão e dependente da escala. Isolando os parâmetros de energia  $\Delta E(L)$  e  $\delta E(L)$  nas equações 1.39, 1.40, 1.41 e 1.42 temos que:

$$\delta E = \frac{\hbar D}{L^2} \quad (1.44)$$

e

$$\Delta E = \frac{e^2 D}{L^d \sigma} \quad (1.45)$$

substituindo 1.44 e 1.45 em 1.43, resulta em:

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} \quad (1.46)$$

Como as equações 1.44 e 1.45 são válidas apenas no limite de estados estendidos, a equação 1.46 também é válida apenas neste limite. O termo  $\sigma L^{d-2}$  é definido como a condutância de um cubo de  $d$  dimensões e de lado  $L$  e condutividade  $\sigma$ . Desta forma,  $g(L)$  pode ser visto como uma condutância generalizada em unidades de  $e^2/\hbar$ . Esta quantidade é essencial para a teoria de escala do modelo de Anderson de onde vem a idéia do parâmetro de escala único. A teoria de escala, para a transição de Anderson, exprime como a função  $g$  escala com o comprimento característico  $L$  do sistema.

Seja  $L_0$  o tamanho inicial de um sistema composto de cubos de volume  $L_0^d$ , então temos que  $g(L_0) = \delta E(L_0) \Delta E(L_0)$ . Dado  $g_0$  no comprimento de escala  $L_0$ , a relação de escala possibilita encontrar  $g$  em um tamanho de escala  $L = bL_0$ . Desta forma, os novos cubos de volume  $L^d$  podem ser obtidos em função dos comprimentos dos cubos originais  $L_0$  e do fator de escala  $b$  como segue:

$$V = (bL_0)^d \quad (1.47)$$

Assim, a condutividade generalizada é completamente determinada por uma função de escala  $f(g_0, b)$  que é função de  $g_0$  e do parâmetro de escala  $b$ . Caso  $b$  seja uma transformação contínua, ou seja,  $b = 1 + \epsilon$ , onde  $\epsilon \ll 1$ , o comportamento de escala pode ser definido pela função de escala diferencial  $\beta(g)$  dada por:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.48)$$

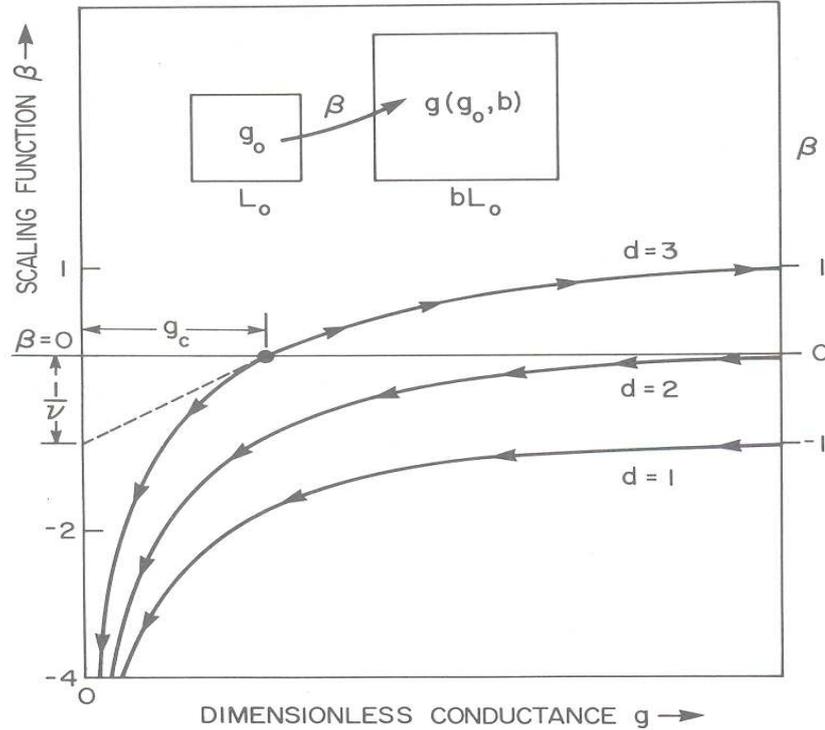


Figura 1.6: *Comportamento da função diferencial de escala  $\beta$  proposto por Abrahams, para  $d=1, 2$  e  $3$  dimensões, em função da condutância generalizada  $g$  [3].*

A figura 1.6 mostra o comportamento da função  $\beta$  definida na equação 1.48 e foi primeiramente proposta por Abrahams e colaboradores em 1979. Para  $\beta > 0$ , a função  $g$  cresce com o crescimento de  $L$  e para  $\beta < 0$  a função  $g$  decresce com o crescimento de  $L$ . Abrahams determinou o comportamento de  $\beta(g)$  através da observação do comportamento assintótico de  $g$ . Como a equação 1.46 é válida no limite macroscópico de estados estendidos, temos que:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2 \quad (1.49)$$

Quando  $g \rightarrow \infty$ , a equação 1.49 mostra o comportamento exibido na figura 1.6 para  $d = 1, 2, 3$ . Para pequeno  $g$ , ou seja, para  $g \ll 1$ , o modelo de Anderson [1] mostra que todos os estados são exponencialmente localizados em grandes

distâncias do centro de localização como mostra a figura 1.5. Desta forma, no contorno de cada dessas caixas de lado  $L$ , a amplitude da função de onda do elétron localizado na caixa é  $e^{-\alpha L}$ , onde o inverso do parâmetro  $\alpha$  é como antes, o comprimento de localização. Como o acoplamento entre as caixas também possui a mesma dependência exponencial com  $L$ , então a condutância generalizada  $g$  também decai exponencialmente, e portanto:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g \quad (1.50)$$

de forma que:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = -\infty \quad (1.51)$$

como mostrado na figura 1.6, independente do valor de  $d$ .

As curvas representadas na figura 1.6 mostram como a função  $g$  muda com o crescimento do comprimento  $L$ . O diagrama de fluxo mostra que existe um ponto instável em  $\beta = 0$  e  $g = g_c$  apenas em  $d = 3$ . Ou seja, temos que:

$$\beta(g_c) = 0 \quad (1.52)$$

no ponto crítico.

O valor  $g_c$  divide os dois regimes de comportamento no gráfico, ele separa a região de forte acoplamento ( $g \rightarrow \infty, g > g_c$ ), da região de fraco acoplamento ( $g \rightarrow 0, g < g_c$ ). Pontos instáveis no diagrama de fluxo representam uma assinatura da transição de fase. O ponto onde  $\beta(g_c) = 0$  indica a transição de Anderson [1] em  $d = 3$ .

Para os casos onde  $d = 1$  e  $d = 2$ , não há ocorrência de pontos instáveis e os fluxos do diagrama apontam para  $g = 0$ . Esse resultado indica que tanto em uma como em duas dimensões não ocorre transição de Anderson, que é o resultado

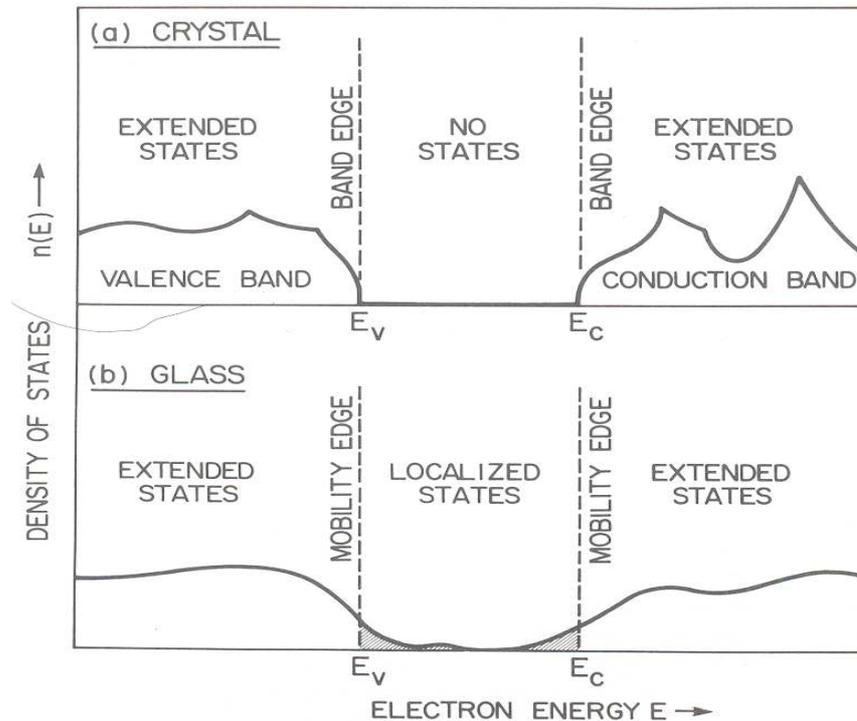


Figura 1.7: (a) densidade de estados típica de um sólido cristalino. (b) densidade de estado para um material amorfo. [3].

principal da teoria de escala. É interessante notar que um resultado semelhante, obtido através de argumentos de escala, já fora obtido por Peierls estabelecendo que não há transição para uma fase com ordem de longo-alcance em duas dimensões. Porém, este é um resultado que deve ser considerado cuidadosamente, uma vez que foram feitas algumas suposições que em geral não condizem com as características apresentadas por materiais reais. Um exemplo disso é que experimentos feitos com Hélio adsorvido em superfícies sólidas não satisfazem esta regra. Além disso, o comprimento de correlação calculado na teoria de escala é em geral muito maior que o tamanho das amostras e portanto regiões ordenadas macroscópicas podem ser obtidas apesar das correlações decrescerem lentamente (logaritmicamente) com o tamanho da amostra, como observado em algumas estruturas líquido-cristalinas.

Em três dimensões, a teoria de escala mostra visivelmente que pode haver uma transição de Anderson em  $g = g_c$ , para sólidos amorfos. O ponto fixo instável é dado por  $(g, \beta) = (g_c, 0)$ . A transição de Anderson ocorre quando o nível de Fermi passa por um *mobility edgy* como mostrado na figura 1.7 (b), lembrando que a discussão feita nesta teoria de escala foi conduzida levando em conta que o elétron tem uma energia fixa  $E$ .

O comportamento crítico, como resultado da teoria do único parâmetro de escala, na transição metal-isolante, é obtido do comportamento das funções de escala nas vizinhanças do ponto crítico e no ponto crítico propriamente dito. Em particular, é analisado como é o declive da função  $\beta$  em  $g = g_c$  além do fato de ocorrer ou não a transição de Anderson. Neste ponto é importante frisar o conceito de expoentes críticos, que controlam o comportamento das funções na região crítica. O comprimento de localização ( $1/\alpha$ ), por exemplo, obedece uma lei de escala como segue:

$$\alpha^{-1} = \frac{1}{(E_c - E)^{-\nu}} \quad (1.53)$$

onde  $\nu$  é o expoente de localização e descreve como o comprimento de localização da função de onda diverge, quando se aproxima do *mobility edgy*  $E_c$ , na região de estados localizados. A condutividade  $\sigma$  tem seu comportamento de escala nas proximidades do ponto crítico dado por:

$$\sigma \sim (E_c - E)^t \quad (1.54)$$

Técnicas diagramáticas (Vollhardt e Wolfie, 1982) e expansão em  $\epsilon$  (Wegner, 1985) estimam que  $t = \nu \simeq 1.0$  (veja por exemplo [5]). Experimentos, no entanto, mostram algumas divergências quanto a esse resultado. Em semicondutores dopados, esses expoentes tem variado em torno dos valores  $t = \nu \simeq 1/2$  para silicene

dopado com fósforo (figura 1.3) e  $t = \nu \simeq 1$  para  $(Al_xGa_{1-x}As)$ . A diferença encontrada entre o expoente calculado na teoria de localização ( $t = \nu \simeq 1$ ) e o encontrado no experimento ( $t = \nu \simeq 1/2$ ) talvez tenha sido causada pela interação coulombiana existente no experimento e desprezada na teoria de localização.

## 1.8 Medidas do grau de localização

Existem alguns parâmetros a serem definidos, que auxiliam na condução do estudo da localização em sólidos desordenados. Em geral, esses parâmetros são calculados levando em conta o comportamento assintótico da função de onda em um meio randômico. Como já foi dito antes, em estados localizados, a função de onda apresenta o seguinte comportamento assintótico:

$$\psi(r) = f(r)e^{-\alpha r} \quad (1.55)$$

onde, como definido anteriormente, o inverso de  $\alpha$  é o comprimento de localização da função de onda,  $r$  a distância do centro de localização e  $f(r)$  é uma função que varia aleatoriamente. No limite em que  $\alpha \rightarrow 0$ , os estados eletrônicos são estendidos. Um outro parâmetro importante na determinação da localização dos estados eletrônicos é o segundo momento da densidade de probabilidade, ou inverso do número de participação introduzido primeiramente por Wegner em 1980 [7] e definido por:

$$\frac{1}{P} = \sum_r |\psi(r)|^4 \quad (1.56)$$

sendo a função de onda  $\psi$  normalizada, ou seja:

$$\|\psi\| = 1 \quad (1.57)$$

Este número mede o quanto a amplitude de probabilidade da função de onda é notavelmente diferente de zero em alguma região espacial da cadeia. Para ondas planas, a participação é uma quantidade que diverge no limite termodinâmico podendo assim representar os estados estendidos. Um outro parâmetro a ser definido é a dimensão fractal, que mostra como a participação escala com o comprimento no limite termodinâmico:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} P(L) = L^{D_f} \quad (1.58)$$

onde  $D_f$  é a dimensão fractal.

Para estados estendidos,  $D_f$  é, em geral, igual a dimensionalidade Euclidiana do sistema  $d$ , e para estados localizados, esse número tende a zero no limite termodinâmico [5]. No ponto crítico  $D_f$  assume valores intermediários refletindo a natureza fractal dos estados eletrônicos na transição.

## 1.9 Correlações no modelo de Anderson

A teoria de escala para o modelo de Anderson prevê que todos os estados eletrônicos são localizados para sistemas de baixa dimensionalidade  $d \leq 2$ , para qualquer quantidade de desordem e apresenta uma transição de Anderson para sistemas de dimensão  $d = 3$  em determinado valor crítico da força da desordem  $W_c$ . Porém, muitos trabalhos recentes indicam que sistemas de baixa dimensionalidade podem apresentar uma transição metal-isolante, contrariando o resultado obtido pela teoria de escala para o modelo de Anderson original. Tal comportamento não esperado é causado pela presença de correlações de algum tipo na distribuição da desordem.

Em 1975, G. Theodorou e M. H. Cohen mostraram que para certos modelos com Hamiltonianos unidimensionais *tight-binding* e desordem nos termos fora da diagonal do Hamiltoniano, os estados no centro da banda de energia eram es-

tendidos [8]. Em 1977, L. Fleishman e colaboradores examinaram a natureza dos estados na energia zero, em sistemas unidimensionais com desordem em termos fora da diagonal no Hamiltoniano, e mostraram que o comprimento de localização diverge para este valor da energia [9]. Contudo, flutuações induzem à localização da função de onda, cujo comportamento assintótico é  $\psi(r) \sim e^{-\alpha\sqrt{r}}$ , mesmo com a divergência do comprimento de localização, diferindo do caso do modelo de Anderson original onde as funções de onda são exponencialmente localizadas. Desta forma, o valor médio do coeficiente de transmissão, que está relacionado à condutividade  $\sigma$ , vai a zero no limite termodinâmico [10]. Em 1989 foi mostrado que um modelo com Hamiltoniano *tight-binding* tipo Anderson, com energias  $\epsilon_i$  de cada sítio e termos de *hopping* aleatórios, pode apresentar uma energia crítica  $E_c$  onde o estado permanece estendido, caso essas desordem sejam correlacionadas [11]. Ainda em 1989, D. H. Dunlap e colaboradores estudaram modelos com correlações tanto no potencial em cada sítio quanto nos termos de *hopping*, mostrando que pode haver uma deslocalização de um pacote de onda eletrônico inicialmente localizado, independente da dimensão espacial [12]. Esses estudos mostraram que, em uma dimensão, o deslocamento quadrático médio cresce com o tempo de propagação  $t$  segundo uma lei de escala  $t^{3/2}$ , indicando um transporte superdifusivo. Meir Grynasty e Shmuel Fishman estudaram o problema da localização em uma dimensão, na presença de um pseudo-potencial randômico dado por  $V_n = \lambda \cos(\pi\alpha|n|^\nu)$ , para um modelo *tight-binding* dado por  $V_n\psi_n + \psi_{n+1} + \psi_{n-1} = E\psi_n$ . Eles verificaram que o caráter metal-isolante desses modelos apresenta várias facetas interessantes, dependendo dos parâmetros que definem esses potenciais. Sendo  $n$  um número inteiro e  $\alpha$  racional, o comportamento é o de um sólido cristalino. Porém, para  $\alpha$  irracional tem-se que para  $\nu \geq 2$  todos os estados são localizados com comprimento de localização semelhante ao modelo equivalente com potencial totalmente aleatório, enquanto que para  $0 < \nu \leq 1$  existem estados estendidos e estados localizados [13].

Neste caso, verificou-se a existência de um *mobility edge* para  $\lambda < 2$ . No centro da banda ( $|E| < 2 - \lambda$ ) existem estados estendidos e nos extremos da banda de energia ( $2 + \lambda > |E| > 2 - \lambda$ ) os estados são localizados. Para  $\lambda > 2$ , todos os estados são localizados. Para  $\nu > 1$ , todos os estados fora do centro da banda são localizados, mesmo que o comprimento de localização seja consideravelmente grande [14].

Em 1990, Dunlap [15] e colaboradores estudaram certas cadeias uni-dimensionais de dímeros aleatórios através de um Hamiltoniano *tight-binding*, com duas energias aleatórias  $\epsilon_a$  e  $\epsilon_b$  e um termo de *hopping* constante  $V$ , responsável pelo transporte entre primeiros vizinhos. Neste modelo, foi mostrado que se as energias dos sítios são postas ao acaso na rede e aos pares com probabilidades  $q$  e  $1 - q$  respectivamente, então uma partícula, posta inicialmente localizada em alguma posição da cadeia pode tornar-se deslocalizada para tempos muito longos. Em particular, se  $-2V < \epsilon_a - \epsilon_b < 2V$ , então, um pacote inicialmente localizado difunde de forma que o desvio quadrático médio cresce superdifusivamente com o tempo de acordo com  $t^{3/2}$ . Porém, caso  $\epsilon_a - \epsilon_b = \pm V$  a evolução do pacote de onda é difusiva e o deslocamento quadrático médio escala com o tempo segundo a potência  $t^1$ . Em qualquer outro regime, a função de onda é localizada exponencialmente. Outros modelos de dímeros, com hamiltoniano *tight-binding*, foram formulados e apresentam em geral algumas energias críticas onde a função de onda deixa de ser localizada para se estender por toda a cadeia.

Em 1997 Hilke introduziu um modelo de Anderson com desordem diagonal diluído [16]. O modelo consistia de duas cadeias interpenetrantes, uma delas composta de potenciais aleatórios e a outra composta de segmentos não aleatórios de potências constantes. Devido à periodicidade, energias ressonantes especiais surgem as quais estão relacionadas à rede não aleatória. O número de energias ressonantes é independente do tamanho do sistema e, portanto, foi conjecturado que estes estados ressonantes estendidos não deveriam ter qualquer influência nas propriedades

de transporte. Um modelo simples para uma liga binária de compostos semicondutores, onde impurezas são colocadas em uma sub-rede, demonstrou analiticamente e numericamente a existência de estados estendidos no centro da banda [17]. O modelo de Anderson diluído foi estendido para incluir uma função de diluição geral que define as energias dentro de cada segmento não aleatório [18]. Usando uma abordagem de decimação, foi demonstrado que o número de modos depende do tamanho do segmento diluidor e das propriedades de simetria da função diluidora. Mais recentemente, foi demonstrado que a emergência de estados estendidos neste modelo promove um alargamento sub-difusivo de um pacote de onda inicialmente localizado [19].

Os estados eletrônicos em modelos de Anderson unidimensionais, com desordem correlacionada têm sido amplamente estudado, uma vez que tais correlações induzem ao aparecimento de estados estendidos [11, 15], que é uma propriedade não usual para sistemas desse tipo. Nesses modelos de baixa dimensionalidade, a presença de desordem de curto alcance induz ao aparecimento de certas energias ressonantes onde nessas energias, os estados eletrônicos são estendidos e formando um grupo de medida nula [51]. Entretanto, se a correlação na desordem é de longo-alcance, é possível ocorrer uma transição metal-isolante em uma dimensão [20, 21]. Vários trabalhos têm sido feitos mostrando que esses sistemas unidimensionais apresentam uma transição de Anderson, com *mobility edges* separando os estados estendidos dos estados localizados. Em 1998, F.A.B.F de Moura e M. L. Lyra estudaram um modelo de Anderson em uma dimensão, onde a desordem no potencial do sítio é correlacionada [20]. Neste modelo, a energia ou potencial por sítio corresponde ao traço de um movimento Browniano fracionário, cuja densidade espectral é dada por:

$$S(k) \propto \frac{1}{k^\alpha} \quad (1.59)$$

onde  $S(k)$  é a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_n \epsilon_m \rangle$ . Neste modelo, os autores utilizaram um Hamiltoniano tight-binding, unidimensional de Anderson, com termo de *hopping* constante entre primeiros vizinhos e igual a 1 dado por:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n (|n-1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|) \quad (1.60)$$

A desordem, com correlação de longo-alcance é introduzida neste modelo, através dos potenciais dos sítios indicados pelos termos da diagonal do Hamiltoniano 1.60. Esses são definidos como:

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right) \quad (1.61)$$

onde  $N$  é o número de sítios e  $\phi_k$  são  $N/2$  fases independentes e aleatórias, distribuídas uniformemente no intervalo de  $[0, 2\pi]$ .

Moura e Lyra encontraram comportamentos interessantes, dependendo do valor do expoente  $\alpha$ . Quando o desvio padrão da energia é igual ao termo de *hopping* entre primeiros vizinhos e  $\alpha < 2$ , então todos os estados eletrônicos permanecem localizados. Para  $\alpha > 2$ , estados estendidos surgem no centro da banda, separados dos estados localizados por dois *mobility edges*. Vários outros modelos de baixa dimensionalidade têm sido propostos, onde a desordem possui correlações de longo-alcance [22, 23, 24, 25, 28], incluindo propriedades de transportes em seqüências de moléculas de DNA [26, 27]. Oscilações de Bloch em cadeias unidimensionais com desordem correlacionada de longo-alcance, onde o elétron é sujeito a um campo elétrico uniforme [28], foram encontradas para um pacote de onda inicialmente Gaussiano e a largura de banda de estados estendidos encontrada estava de acordo com a previsão teórica a campo nulo. Desta forma, correlações na desordem têm sido consideradas como sendo um dos mecanismos básicos para a quebra da localização em sistemas

desordenados de baixa dimensionalidade.

## 1.10 Acoplamentos de longo-alcance

De forma geral, apenas para dimensões  $d > 2$ , sistemas desordenados sofrem uma transição de estado localizado para estados estendidos (transição metal-isolante ou transição de Anderson) [1]. Porém, como já foi dito, vários modelos de baixa dimensionalidade contrariam esse resultado, caso a desordem possua alguma espécie de correlação. Propriedades não usuais de deslocalização eletrônica em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade podem ser obtidas não apenas introduzindo correlações na desordem, mas também introduzindo acoplamentos de longo-alcance [29, 30, 31]. Mirlin e colaboradores, em 1996 estudaram certos tipos de matrizes aleatórias, cujos termos decrescem como uma lei de potência tipo:

$$H_{ij} \sim |1 - j|^{-\alpha} \quad (1.62)$$

Esse tipo de problema pode ser usado para descrever sistemas eletrônicos unidimensionais, com amplitude de *hopping* de longo-alcance que decaem com a distância segundo  $1/r^\alpha$  [29]. Para  $\alpha = 1$ , esse sistema apresenta uma transição metal isolante, enquanto que todos os estados permanecem localizados para  $\alpha > 1$  e todos os estados permanecem estendidos para  $\alpha < 1$ . Esse sistema representa uma série de sistemas físicos como, por exemplo, duas partículas interagentes em um potencial aleatório unidimensional [134] entre outros. Esse modelo permite o estudo do comportamento universal de escala, nas vizinhanças da transição de Anderson. Em  $\alpha = 1$ , este modelo apresenta multifractalidade e uma estatística espectral intermediária entre a estatística de Wigner-Dyson, típica de estados estendidos e a estatística de Poisson para estados exponencialmente localizados. Através de uma diagonalização exata Lima e colaboradores investigaram numericamente a natu-

reza dos auto estados eletrônicos de um modelo de Anderson unidimensional, cujas amplitudes de *hopping* decaem segundo a equação 1.62 [31]. Foi demonstrado rigorosamente que a função de distribuição do inverso da função de participação é invariante por escala, nesse modelo [32, 30]. Este resultado confirmou a conjectura de que as distribuições associadas a quantidades físicas relevantes são universais no ponto crítico [33, 34]. Recentemente, modelos com acoplamentos de longo-alcance não aleatórios mas com as energias dos sítios distribuídas aleatoriamente demonstraram que os estados em um dos extremos da banda podem tornar-se deslocalizados quando os acoplamentos decaem mais lentamente que  $1/r^{3/2}$  [35, 36].

## 1.11 Excitações magnéticas e vibracionais em meios desordenados

A natureza das excitações coletivas de um mágnon em sistemas ferromagnéticos desordenados tem uma relação próxima com os auto-estados de um elétron no modelo *tight-binding* de elétrons não interagentes em um meio aleatório [37, 38, 39, 40, 41, 43]. Em uma rede tridimensional, na presença de desordem fraca, as ondas de spins de alta energia são exponencialmente localizadas. Os estados de baixa energia permanecem estendidos embora adquiram um comprimento de coerência finito. Para desordem forte, todos os estados de um mágnon tornam-se exponencialmente localizados. Em baixas dimensões, especialmente em cadeias ferromagnéticas desordenadas, os estados de um mágnon com energia finita são exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem, de acordo com a previsão da teoria de escala para a transição de Anderson. Entretanto, os estados de baixa energia têm um longo comprimento de onda e exibem comprimento de localização que diverge no fundo da banda. Esta propriedade resulta em características bastante peculiares relacionadas ao transporte de excitações magnéticas em sistemas ferromagnéticos de

baixa dimensionalidade que não são compartilhadas por sistemas eletrônicos. Em particular uma excitação magnética inicialmente localizada pode exibir um alargamento superdifusivo na presença de desordem, contrastando com a localização exponencial de um pacote de onda eletrônico [40, 41].

Os modos vibracionais coletivos de cadeias harmônicas desordenadas também podem ser mapeados no modelo de Anderson unidimensional [44]. A maioria dos modos vibracionais são localizados para qualquer grau de desordem, com exceção dos modos de baixa energia, cujo número é da ordem da raiz quadrada do número de átomos da cadeia, que têm comprimento de localização maior que o tamanho da cadeia e portanto são efetivamente estendidos [46]. O transporte de energia em cadeias harmônicas desordenadas é fortemente influenciado pelos estados efetivamente estendidos, apresentando um caráter subdifusivo ou superdifusivo, para diferentes formas da excitação inicial [49]. Correlações na distribuição de massa podem produzir novos modos estendidos [47, 48]. No caso de correlações de longo-alcance, uma banda de estados estendidos surge possibilitando o transporte balístico de energia [50].

Portanto, correlações e acoplamentos de longo-alcance podem provocar uma violação da teoria de escala em sistemas de baixa dimensionalidade. No restante desta tese, nós exploraremos as propriedades físicas de alguns sistemas que pertencem a essa classe de modelos com o objetivo de melhor compreender o fenômeno da deslocalização em sistemas unidimensionais.

## Capítulo 2

# Evolução temporal do pacote de onda no modelo de Anderson diluído

No capítulo anterior, vários modelos envolvendo sistemas eletrônicos desordenados, bem como outras formas de excitações coletivas em meios aleatórios foram discutidos. Esses trabalhos foram baseados no modelo de Anderson que contém os ingredientes básicos para se estudar a influência da desordem na natureza dos estados estacionários destes sistemas, em particular a tendência de localização espacial destes estados e a consequente ausência de transporte efetivo ao longo de grandes distâncias. Várias versões do modelo de Anderson [11, 15] vêm contrariando o resultado, até então aceito, de que em dimensões  $d \leq 2$ , todos os estados eletrônicos são localizados, independente da quantidade de desordem [6]. Verificou-se que a existência de correlações de curto ou longo alcance na desordem pode ocasionar o aparecimento de estados estendidos mesmo em sistema de baixa dimensionalidade [51]. A ausência de localização, mesmo na presença de desordem,

foi verificada experimentalmente em poliamina dopada [52], onde foi mostrado que esse sistema apresenta um comportamento que pode ser modelado pelo modelo de dímeros aleatórios [15].

O modelo de Anderson diluído tem encontrado destaque na comunidade científica entre os modelos de baixa dimensionalidade que contradizem a teoria de escala do modelo de Anderson original. Em 1996, Hilke estudou um modelo *tight-binding* de Anderson diluído. Neste modelo, a desordem está presente no potencial  $\epsilon_i$  de cada sítio [51] e a seqüência de sítios é feita de forma que existem duas cadeias interpenetrantes, sendo uma delas com potenciais aleatórios e a outra com potenciais determinísticos e constantes. Este modelo apresenta algumas energias ressonantes devido à periodicidade e tem relação com a constante de rede da cadeia não aleatória. Estes estados ressonantes têm as amplitudes das funções de onda nulas nos sítios da rede aleatória. Este modelo, portanto, apresenta estados estendidos nas energias ressonantes caso um sítio randômico tenha dois sítios de potenciais constantes como vizinhos mesmo em baixas dimensões. Em 2003, F.A.B.F de Moura e colaboradores estudaram a dinâmica de um pacote de onda eletrônico, em um modelo de Anderson diluído em uma dimensão, onde a impureza da cadeia de Anderson é diluída através de uma função periódica  $f(l)$ . F.A.B.F de Moura estimaram todos os estados estendidos existentes neste modelo e confirmaram o resultado de que o número desses estados estendidos está relacionado com a simetria da função de diluição  $f(l)$ .

Em 2003, Hilke estendeu o modelo de Anderson diluído para duas dimensões, no qual a desordem é incorporada em linhas alternadas de uma rede quadrada [53]. Este modelo exhibe uma transição metal-isolante verdadeira, apresentando uma banda de estados estendidos. Um comprimento de correlação finito favorece o sistema a comportar-se como condutor antes de tornar-se eventualmente localizado. O grande comprimento de correlação desse modelo pode explicar as grandes flutuações na condutância e o comportamento metálico de alguns sistemas experimentais [54, 55].

Uma técnica bastante empregada para investigar o caráter da localização da função de onda é analisando a dinâmica da evolução temporal da mesma, ou seja, como a onda se propaga como função do tempo. A expansão de um pacote de onda inicialmente localizado tem sido amplamente estudada em vários modelos, uma vez que este fenômeno está diretamente relacionado às propriedades de transporte em um sólido desordenado. Quando o elétron está inicialmente localizado em determinada posição, é possível medir a probabilidade do mesmo ser encontrado naquela posição. Caso a probabilidade do elétron ser encontrado na mesma posição decaia com o tempo, isso significa que o estado é estendido e ocorre a difusão. Caso contrário, o elétron permanece localizado.

## 2.1 O modelo de Anderson e a expansão do pacote de onda

O Hamiltoniano *tight-binding* uni-dimensional de Anderson é dado por:

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

onde  $|n\rangle$  é, como descrito no capítulo anterior, o orbital atômico ou estado de Wannier para o sítio  $n$  e  $\epsilon_n$  é o potencial do respectivo sítio.  $V_{n,m}$  representa o termo *dehopping* entre os sítios  $n$  e  $m$ . Tomando os termos de hopping apenas entre os primeiros vizinhos, temos:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_i (V_{n-1,n} |n-1\rangle\langle n| + V_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1|) \quad (2.2)$$

Podemos escrever os estados estacionários como sendo uma expansão em termos dos orbitais moleculares na forma:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle \quad (2.3)$$

onde  $\psi_n$  é a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron na posição  $n$  da cadeia. Substituindo 2.3 em 2.2, e supondo que o Hamiltoniano possui auto-energias  $E$ , temos:

$$(E - \epsilon_n)\psi_n = t_{n,n+1}\psi_{n+1} + t_{n-1,n}\psi_{n-1} \quad (2.4)$$

que é a equação de Anderson para o estado estacionário da função de onda no sítio  $n$  e cuja solução depende da distribuição espacial do potencial de ligação em cada sítio e das amplitudes de *hopping*.

### 2.1.1 Comportamento de escala da função de onda e desvio quadrático médio

Um dos motivos de se estudar o comportamento assintótico da função de onda é que esse estudo é capaz de descrever as propriedades de condução de um modelo com ou sem desordem. Recentemente, alguns trabalhos têm sido publicados, mostrando que as dimensões fractais  $D_2^\nu$  e  $D_2^\phi$  que estão relacionados respectivamente com o espectro de energia e com as auto-funções, podem descrever a evolução temporal da função de onda e sua expansão caso o pulso mantenha sua forma durante a propagação [56]. O segundo momento ou desvio quadrático médio escala com o tempo segundo a expressão:

$$\sigma^2 \sim t^{2\gamma} \quad (2.5)$$

onde  $\gamma = D_2^\nu/D_2^\phi$ . A probabilidade de retorno escala com o tempo segundo:

$$P_0(t) \sim t^{-D_v^2} \quad (2.6)$$

para tempos muito longos, onde  $P_0(t)$  é a probabilidade de encontrar o elétron, após um intervalo de tempo  $t$  na posição inicial. Portanto, acompanhando a evolução temporal da largura do pacote de onda e da probabilidade de retorno é possível obter os expoentes característicos tanto dos estados estacionários quanto do espectro de auto-energias do sistema em consideração.

### 2.1.2 Evolução do pacote de onda para uma cadeia periódica

Considerando o caso particular em que o potencial da rede tem uma periodicidade perfeita, os termos  $\epsilon_i$  são constantes e podem ser tomados iguais a zero sem perda de generalidade. Os termos de *hopping* entre primeiros vizinhos podem ser considerados como a unidade de energia. Então as soluções da equação de onda são funções de Bloch dependentes do tempo dadas por:

$$|\psi_k(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \exp(ikn - iE_k t) |n\rangle \quad (2.7)$$

onde  $N$  é o número total de sítios e cujas energias  $E_k$  são dadas por:

$$E_k = 2\cos(k). \quad (2.8)$$

Se o pacote de onda é inicialmente localizado no sítio  $n = 0$ , sua função de onda num instante  $t$  qualquer pode ser decomposta tendo como base os estados de Wannier ( $|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |n\rangle$ ), cujos coeficientes correspondentes são dados por:

$$\psi_n(t) = \frac{1}{N} \sum_k \exp(ikn - iE_k t) \quad (2.9)$$

No limite de  $N$  muito grande, podemos transformar o somatório em 2.9 em uma integral em  $k$ . Assim, temos:

$$\psi_n = \exp\left(-\frac{in\pi}{2}\right) J_n(2t) \quad (2.10)$$

onde os  $J_n$  são funções de Bessel de ordem  $n$ . Para este caso, o deslocamento quadrático médio fica definido como:

$$\sigma^2(t) = \sum_n n^2 |\psi_n(t)|^2 \quad (2.11)$$

onde consideramos explicitamente que o elétron tenha sido posto inicialmente no sítio localizado na posição  $n = 0$ . Substituindo a equação 2.10 na equação anterior, e usando as propriedades das funções de Bessel, temos que:

$$\sigma^2(t) = 2t^2 \quad (2.12)$$

Desta forma, para uma cadeia infinita e periódica cujas soluções são funções de Bloch, a função de onda alarga-se de forma linear com o tempo, ou seja, de maneira balística [57]. Ainda no regime assintótico, a probabilidade de encontrar o elétron após um certo intervalo de tempo na posição inicial é dada por:

$$P_0 = |J_0(2t)|^2 \quad (2.13)$$

cujos comportamento assintótico para tempos longos é [58]:

$$P_0 \sim \frac{1}{t} \cos^2(2t) \quad (2.14)$$

Esse resultado é válido para uma rede com periodicidade perfeita. O decaimento da probabilidade de retorno proporcionalmente a  $1/t$  indica que  $D_2^\phi = 1$ , ou seja, que os estados estacionários são uniformemente estendidos ao longo da cadeia,

como esperados para estados de Bloch. Combinando o decaimento da probabilidade de retorno com a dinâmica balística, obtemos que o expoente  $D_2'' = 1$  que reflete o fato de que o espaçamento médio entre os níveis de energia que efetivamente participam do transporte eletrônico é proporcional a  $1/N$ .

## 2.2 Evolução do pacote de onda para o modelo de Anderson diluído

Para cadeias onde a periodicidade não está presente, os estados eletrônicos podem apresentar várias características interessantes como, por exemplo, o surgimento de estados localizados em função das interferências quânticas destrutivas que ocorrem no sistema devido à ausência de periodicidade. Após a descoberta experimental dos quasi-cristais, muita atenção tem sido dada a sistemas quasi-periódicos tais como a seqüência binária de Fibonacci, a qual é uma seqüência considerada intermediária entre a periodicidade e a aleatoriedade. Neste caso, os auto-estados correspondentes são críticos [59]. Também têm sido investigadas as propriedades eletrônicas de transporte em sistemas que apresentam seqüências determinísticas aperiódicas, tais como a seqüência de Thue Morse. As seqüências aperiódicas apresentam propriedades de homogeneidade que são relevantes para a física dos quasi-cristais [60]. Através de resultados numéricos, D.E. Katsanos encontrou em 1995 que, para a seqüência aperiódica de Thue Morse, o desvio quadrático médio escala com o tempo de forma superdifusiva ( $\sigma^2 \sim t^{3/2}$ ) e a probabilidade de retorno apresenta interessantes oscilações auto-similares [57].

Em geral, sistemas eletrônicos unidimensionais com desordem apresentam pacotes de onda localizados exponencialmente, o que implica que tanto a probabilidade de retorno quanto a largura da função de onda permanecem finitas para tempos longos. A dinâmica eletrônica, bem como o comportamento assintótico da

função de onda e seu desvio quadrático médio, são determinados pelo conjunto de equações de Schrödinger dependente do tempo, que para o Hamiltoniano descrito na equação 2.2, são dadas por:

$$i\dot{\psi}_n(t) = \epsilon_n\psi_n(t) + V(\psi_{n-1}(t) + \psi_{n+1}(t)), n = 1, 2, 3 \dots N \quad (2.15)$$

onde  $V$  é a amplitude de *hopping*, considerada aqui entre primeiros vizinhos e constante. O deslocamento quadrático médio, para uma partícula introduzida no sítio  $n = n_0$  é dado por:

$$\sigma^2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 |\psi_n(t)|^2 \quad (2.16)$$

No restante deste capítulo, iremos investigar as propriedades dinâmicas do modelo de Anderson diluído em uma dimensão. Este modelo consiste em uma cadeia com potencial constante intercalada a uma outra cadeia com potenciais aleatórios. Desta forma, existem duas cadeias interpenetrantes, sendo uma com potencial constante e outra com potenciais aleatórios não correlacionados. O Hamiltoniano *tight-binding* é representado pela equação 2.2, tomando os termos de *hopping*  $V = 1$ . O potencial da sub-rede periódica é dado  $\epsilon_0$  e o potencial da sub-rede aleatória, ou cadeia de Anderson, é dado por  $\epsilon_n$  que varia aleatoriamente no intervalo de  $[-5, 5]$ . A largura da desordem foi tomada como muito maior que a amplitude de *hopping*, uma vez que neste limite comportamentos transientes ocorrem em uma escala de tempo mais curta. No modelo que estudaremos abaixo, cada sítio puro, ou de potencial não aleatório, tem como vizinho dois sítios de Anderson, ou de potencial aleatório [51].

O conjunto de equações 2.15 foi resolvido utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem [61], com um passo dado por  $\Delta t = 0.01$ . Consideramos que o elétron encontra-se inicialmente localizado na posição  $n = n_0$  no centro da cadeia, ou seja,  $\psi_n(t = 0) = \delta_{n,n_0}$ . Em nossos cálculos numéricos, o desvio médio quadrático

foi definido como:

$$\sigma^2(t) = \sum_{n=1}^N (n - \langle n(t) \rangle)^2 |\psi_n(t)|^2 \quad (2.17)$$

onde

$$\langle n(t) \rangle = \sum_{n=1}^N n |\psi_n(t)|^2 \quad (2.18)$$

Com o objetivo de minimizar os erros em nossos cálculos numéricos, utilizamos em nossas simulações cadeias longas com  $N$  sendo da ordem de  $6 \times 10^4$ . Para evitar efeitos de borda devido a possíveis reflexões do pacote de onda nos extremos da cadeia, nós acompanhamos a evolução temporal durante um intervalo de tempo longo, mas finito, de forma que as amplitudes da função de onda nos extremos da cadeia ( $\psi_1(t)$  e  $\psi_N(t)$ ) ainda permanecessem numericamente nulas. Apesar de finito, o intervalo de tempo considerado foi muito maior que o tempo transiente inicial da evolução do pacote de onda. Desta forma nossos resultados puderam capturar bem o comportamento assintótico da função de onda para tempos longos. Nós escolhemos a condição inicial de duas formas: o elétron parte do centro da cadeia em um sítio de Anderson (potencial aleatório) ou então o elétron parte de um sítio puro (potencial constante).

Foram feitas 100 configurações distintas de desordem para dois valores do potencial da rede pura  $\epsilon_0$ . O primeiro valor tomado foi  $\epsilon_0 = 1$  e portanto distinto do valor médio do potencial da sub-rede aleatória. Neste caso, já foi demonstrado na literatura a existência de estados estendidos tanto analiticamente quanto numericamente com técnicas de decimação [16, 18]. Para esse modelo, a densidade de estados apresenta um pseudo-gap em que a densidade de estados decai exponencialmente quando a energia se aproxima de  $E_c = 1$ , vindo de valores abaixo de  $E_c$ . Em  $E_c = 1$  a densidade de estados apresenta uma singularidade. Este pseudo-gap é reminescente do gap de energia que aparece em cadeias binárias. A energia ressonante, que

corresponde a um estado estendido, encontra-se na singularidade da densidade de estados. O comprimento de localização diverge segundo:

$$\xi \propto \frac{1}{E - E_c} \quad (2.19)$$

quando a energia  $E$  se aproxima da energia de ressonância  $E_c$  [19].

A seguir, mostramos uma figura (fig 2.1) típica para o deslocamento quadrático médio  $\sigma(t)$  como função do tempo, para uma cadeia com 60000 sítios e potencial da cadeia pura dado por  $\epsilon_0 = 1$ , para duas posições iniciais do elétron  $n_0$ . Em uma delas, o elétron é posto num sítio de Anderson (potencial aleatório) e na outra, o elétron é posto num sítio da cadeia pura (potencial não aleatório). É possível notar a clara diferença entre o comportamento assintótico do deslocamento quadrático médio  $\sigma$ , com relação à condição inicial. Os expoentes dinâmicos, com respeito as duas condições iniciais do elétron são distintos. Para o elétron inicialmente localizado na posição  $n_0$  de um sítio puro, a função de onda expande de forma difusiva:

$$\sigma \propto t^{0.5} \quad (2.20)$$

apresentando um caráter estendido. Quando o elétron é posto inicialmente num sítio de Anderson ou de potencial aleatório, o pacote de onda apresenta um alargamento inicial, mas o deslocamento quadrático médio permanece finito no limite de  $t \rightarrow \infty$ , caracterizando assim o aspecto localizado do pacote de onda. Gostaríamos de ressaltar aqui, uma análise de escala de nossos resultados mostrou que não é possível descartar nesse caso a possibilidade de um alargamento muito lento do tipo logarítmico.

Na Fig 2.2, nós mostramos a evolução temporal do pacote de onda, ou deslocamento quadrático médio  $\sigma(t)$  para um elétron se propagando em uma cadeia novamente com  $N = 60000$  sítios e tomando o potencial fixo da cadeia pura como  $\epsilon_0 = 0$ , isto é, igual ao valor médio do potencial aleatório. Neste caso, a densi-

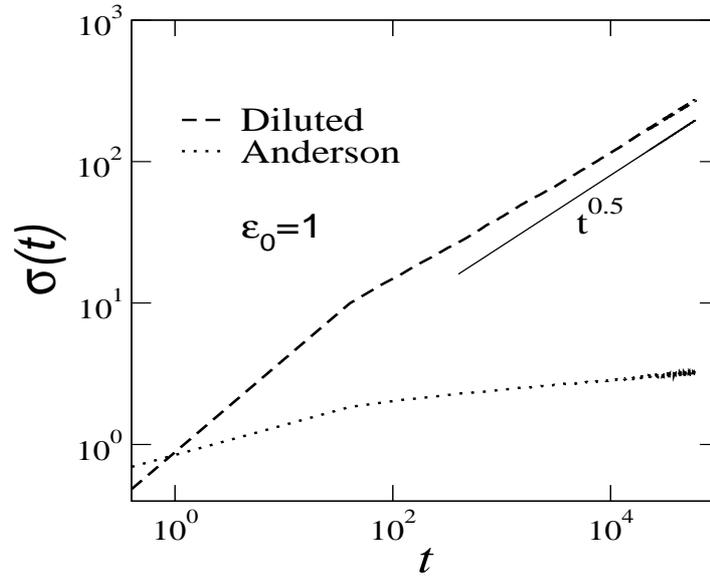


Figura 2.1: Deslocamento quadrático médio do elétron  $\sigma(t)$ , como função do tempo para modelo de Anderson diluído unidimensional em uma cadeia de  $6 \times 10^4$  sítios e potencial da rede pura  $\epsilon_0 = 1$ .  $n_0$  foi tomado de duas formas:  $n_0$  pertencente a um sítio de Anderson e  $n_0$  pertencente a um sítio da cadeia pura

dade de estados não apresenta um pseudo-gap e o comprimento de localização nas vizinhanças da energia ressonante  $E_c = 0$  possui uma divergência da forma [16, 19]:

$$\xi \propto \frac{1}{(E - E_c)^{3/2}} \quad (2.21)$$

e portanto mais rápida do que a encontrada para o caso  $\epsilon_0 = 1$  (eq 2.19). Assim como na análise anterior, na figura 2.1 o elétron foi posto inicialmente em duas posições distintas: a posição inicial  $n_0$  encontra-se num sítio de Anderson (linha pontilhada) ou então, num sítio puro (linha tracejada).

Novamente, é possível notar a nítida diferença de comportamento assintótico da evolução temporal do deslocamento quadrático médio  $\sigma$ , dependendo da condição inicial para  $n_0$ . Para o elétron posto inicialmente em um sítio de Anderson, a expansão do pacote de onda, ou do desvio quadrático médio, ocorre apenas durante o transiente inicial de forma manter o pacote localizado, assim como ocorreu no caso

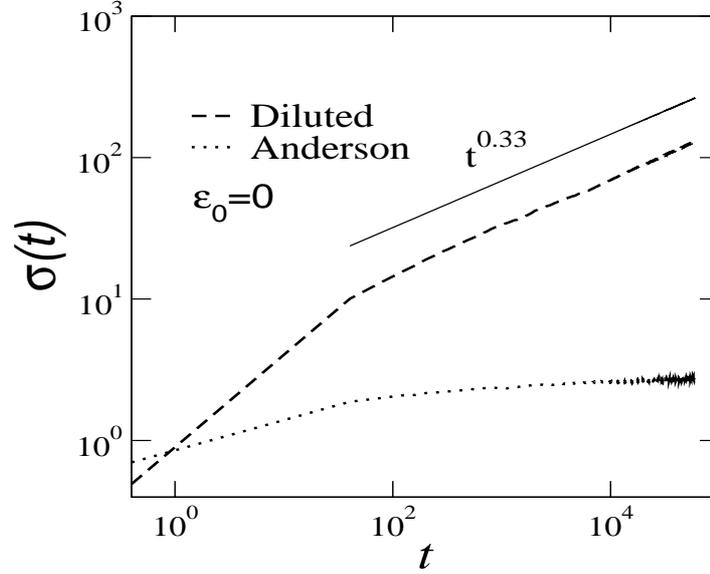


Figura 2.2: Deslocamento quadrático médio do elétron  $\sigma(t)$ , como função do tempo para modelo de Anderson diluído unidimensional em uma cadeia de  $6 \times 10^4$  sítios e potencial da rede pura  $\epsilon_0 = 0$ .  $n_0$  foi tomado de duas formas:  $n_0$  pertencente a um sítio de Anderson e  $n_0$  pertencente a um sítio da cadeia pura. Este plot mostra nitidamente a sensibilidade da dinâmica da função de onda com a condição inicial.

anterior. Por outro lado, considerando o elétron inicialmente localizado num sítio da rede pura, a largura da função de onda apresenta um crescimento subdifusivo, com o deslocamento quadrático médio comportando-se assintoticamente com o tempo segundo a forma:

$$\sigma \propto t^{0.33}. \quad (2.22)$$

Os diferentes comportamentos dinâmicos do alargamento do pacote de onda, obtidos para ambos os valores do potencial  $\epsilon_0$  da rede pura,  $\epsilon_0 = 0$  e  $\epsilon_0 = 1$ , podem ser relacionados às distintas maneiras de como ocorrem as divergências do comprimento de localização nos dois casos e também ao comportamento da densidade de estados nas proximidades da energia de ressonância  $E_c$ , onde  $\xi \propto 1/(E - E_c)$  com a singularidade no extremo do pseudo-gap de energia em  $\epsilon_0 = 1$ , enquanto que

$\xi \propto (E - E_c)^{3/2}$ , não existindo gap de energia em  $E = E_c$ , para  $\epsilon_0 = 0$ .

A sensibilidade do alargamento da função de onda com a condição inicial pode ser entendida notando que um pacote de onda inicialmente localizado, possui uma distribuição espectral larga e, desta forma, a contribuição para a evolução temporal vem de muitos auto-estados de energia. Entretanto, um pacote de onda eletrônico, localizado na subrede aleatória não possui contribuições vindo do estado estendido, pois este tem amplitudes de probabilidade nulas na sub-rede aleatória.

Para ilustrar esse comportamento, calculamos a soma das componentes de todos os auto-estados separadamente em cada sub-rede, através das quantidades:

$$\Lambda_A = \sum_{n=1,3,5,\dots,N-1} |\psi_n(E)|^2 \quad (2.23)$$

para a cadeia de Anderson, onde a soma estende-se apenas sobre os sítios com potencial aleatório. Analogamente, temos:

$$\Lambda_D = \sum_{n=2,4,6,\dots,N} |\psi_n(E)|^2 \quad (2.24)$$

com a soma restrita apenas para os sítios da sub-rede pura.

As funções de onda  $\psi_n(E)$  foram obtidas através da diagonalização exata do Hamiltoniano tridiagonal dado em 2.2. Em particular, consideramos uma cadeia de 500 sítios com condições periódicas de contorno com  $\epsilon_0 = 1$ . As quantidades  $\Lambda_A(E)$  e  $\Lambda_D(E)$ , dadas pelas equações 2.23 e 2.24 respectivamente, estão mostradas na figura 2.3. Esta figura mostra nitidamente que os estados estendidos neste modelo encontram-se totalmente na cadeia diluída ou de potencial não aleatório, ou seja,  $\Lambda_A(E_c) = 0$ .

Além disso, as amplitudes das funções de onda na cadeia de Anderson vão para zero à medida que os estados se aproximam da energia de ressonância (fig 2.3). Desta forma, quando um pacote de onda é iniciado de forma totalmente localizada

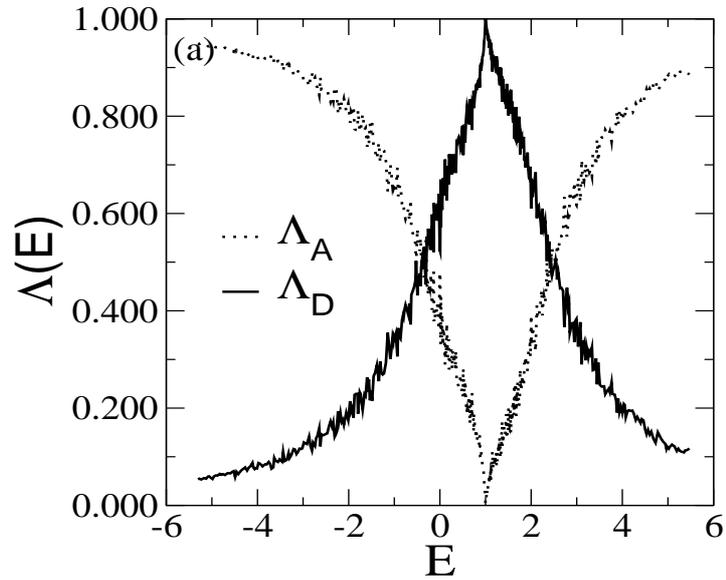


Figura 2.3: Soma das componentes da função de onda sobre a cadeia de Anderson ( $\Lambda_A = \sum_{n=1,3,5,\dots,N-1} |\psi_n(E)|^2$ ) e sobre a cadeia pura ( $\Lambda_D = \sum_{n=2,4,6,\dots,N} |\psi_n(E)|^2$ ) obtida usando diagonalização exata em uma cadeia com 500 sítios. Os zeros de  $\Lambda_A(E_c)$  indicando que os estados estendidos estão localizados totalmente na rede pura

em um sítio da rede de Anderson, poucas são as contribuições vindas de estados efetivamente estendidos, fazendo com que o alargamento da função de onda se dê de forma muito suave.

O alargamento lento do pacote de onda indica que o mesmo desenvolve uma "cauda" que decai com uma lei de potência em função da distância ao centro do pacote. A figura 2.4 mostra a distribuição espacial da função de onda  $|\psi_n|^2$ , após passado um longo intervalo de tempo ( $t > 10000$ ). Os dados foram obtidos fazendo uma média sobre 100 realizações de desordem. Consideramos ambas as condições iniciais (elétron na sub-rede de Anderson e elétron na sub-rede pura) e para os dois valores do potencial dos sítios da cadeia pura:  $\epsilon_0 = 1$  e  $\epsilon_0 = 0$ .

Em qualquer dos valores de  $\epsilon_0$  a função de onda apresenta um decaimento tipo lei de potência seguido de um regime com decaimento exponencial devido ao tempo finito de integração utilizado. Essas leis de potência são distintas dependendo

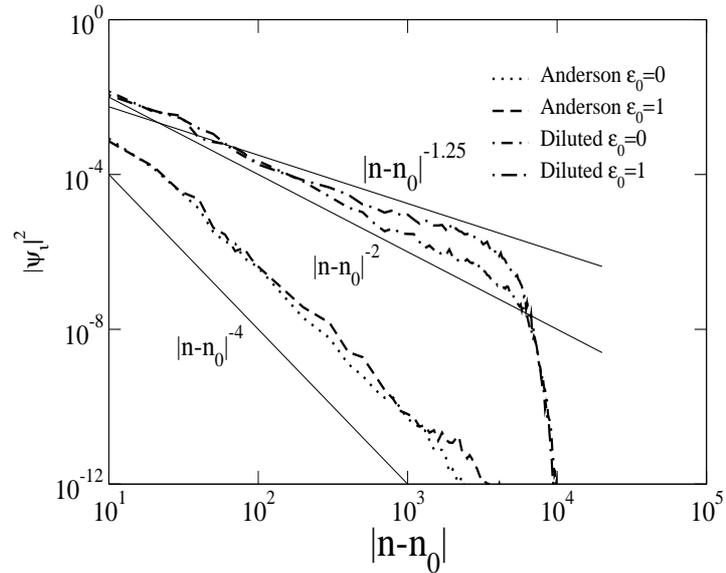


Figura 2.4: Média do quadrado da componente da função de onda após um longo tempo de expansão ( $t > 10000$ ) como função da distância ao sítio  $n_0$  ( $n - n_0$ ) para duas condições iniciais e dois valores para o potencial de rede pura  $\epsilon_0$ . os expoentes de decaimento são da base para a linha mais alta,  $D_\Phi = 4.0, 4.0, 2.0$  e  $1.25$

das condições iniciais e valores do potencial  $\epsilon_0$  dos sítios da cadeia pura, dando mais um reforço ao fato de que neste modelo, o comportamento assintótico da dinâmica do pacote de onda apresenta sensibilidade às condições iniciais.

Em resumo, apresentamos neste capítulo um modelo de Anderson unidimensional simples onde a cadeia de Anderson é diluída de forma que entre dois sítios de Anderson, existe um sítio de uma sub-rede pura com potencial  $\epsilon_0$  em cada sítio. Nós iniciamos a propagação do pacote de onda eletrônico com o elétron totalmente localizado em um sítio nas proximidades do centro da cadeia e resolvemos o sistema de equações de Schrödinger acopladas para calcular o deslocamento quadrático médio do elétron através das componentes dos estados estacionários.

Devido à presença de estados estendidos, este modelo não apresenta a localização usual do pacote de onda comum dos sistemas eletrônicos desordenados unidimensionais. Nós obtivemos uma dependência não-trivial da evolução temporal

do pacote de onda com a posição inicial do elétron.

Quando o elétron é posto inicialmente em um sítio da cadeia pura, o pacote de onda eletrônico apresenta uma expansão mais rápida do que a apresentada quando o elétron é posto inicialmente num sítio de Anderson ou de potencial aleatório. Os estados estendidos neste modelo estão localizados nos sítios da cadeia pura e, sendo assim, um pacote de onda totalmente localizado em um sítio da cadeia de Anderson tem uma pequena contribuição vinda da componente espectral com grandes comprimentos de localização. Desta forma, a função de onda expande de forma mais lenta que no caso onde o elétron é posto inicialmente localizado no sítio da cadeia pura. Além disso, nós mostramos neste modelo que a "cauda" da função de onda desenvolve uma distribuição espacial tipo lei de potência (ver Fig 2.4) e os característicos expoentes de escala da distribuição espacial da função de onda são diferentes para distintas condições iniciais (ver Fig 2.4), mostrando assim, que o comportamento dinâmico assintótico, é extremamente sensível às condições iniciais do modelo.

Esses resultados podem, em princípio, ser verificados experimentalmente utilizando-se super-redes de semicondutores com impurezas localizadas em camadas alternadas. As propriedades de transporte eletrônico neste tipo de amostra devem ser sensíveis à natureza da camada de injeção de portadores de carga. Entretanto, espalhamento incoerente sobre as impurezas e a dificuldade de excitação em uma única camada pode tornar difícil a execução do experimento. Embora o espalhamento dos portadores de carga pelas impurezas possa limitar a observação experimental deste efeito para super-estruturas finas, o que implicaria numa análise mais criteriosa dos efeitos de tamanho finito, a excitação de uma única camada pode ser feita opticamente bombeando a super-rede com um laser focalizado.

# Capítulo 3

## Modos vibracionais em cadeias harmônicas com desordem diluída

### 3.1 Introdução

Dentro do contexto de física do estado sólido, o estudo de fônons (modos vibracionais) em sistemas amorfos é um ponto importante e com recentes avanços [50, 47, 49, 62]. Em sistemas de baixa dimensionalidade, o transporte de energia através dos fônons pode ser diretamente aferido calculando-se a evolução temporal do desvio quadrático médio de um pulso energético inicialmente localizado no material [47, 49]. O desvio quadrático médio está relacionado à condutividade térmica pela formula de Kubo [49]. Uma das vantagens de se estudar o desvio quadrático médio é que esta quantidade não depende das condições de contorno do sistema. Outra característica interessante do segundo momento da distribuição de energia é que este apresenta comportamentos diferentes, dependendo da excitação inicial do pulso. Basicamente, o desvio médio quadrático apresenta super-difusão quando a decomposição espectral do pulso inicial contém frequências típicas do modo uniforme (frequências baixas) e sub-difusão quando os modos de frequência baixa são excluídos do pulso inicial. O

comportamento da condutividade térmica, em altas temperaturas aparenta ser determinado pelas propriedades de desordem e anarmonicidade [62]. Em baixas temperaturas, mesmo em cadeias clássicas não-lineares, os modos vibracionais harmônicos contribuem de forma dominante para o transporte energético bem como para a condutividade térmica. Dentro deste contexto, o estudo dos modos vibracionais em sistemas atômicos representa, de fato, uma questão que continua em debate nos dias de hoje[47, 49, 63, 64, 65, 66]. Vamos apresentar uma breve revisão dos recentes estudos sobre transporte energético em sólidos de baixa dimensionalidade e suas relações com a distribuição de desordem bem como anarmonicidade.

Em 1994, Datta e Kundu [47, 49] estudaram o transporte em cadeias harmônicas desordenadas com diferentes correlações entre as massas. A presença das correlações na distribuição de desordem modifica o comportamento do comprimento de localização na região de frequências baixas. Desta forma, a fração de modos vibracionais estendidos cresce em comparação ao caso não correlacionado. Para cadeia harmônica com desordem não-correlacionada, o número de modos estendidos é da ordem de  $\sim N^{1/2}$ , onde  $N$  é o número de átomos na cadeia. Esse mesmo comportamento é obtido para uma cadeia com desordem tipo dímero. No caso da cadeia harmônica com correlações tipo trímeros, o número de modos estendidos ou não espalhados escala com o tamanho da cadeia como  $\sim N^{3/4}$  ou  $\sim N^{5/6}$  dependendo da estrutura do trímeros. Em boa concordância analítica/numérica, o segundo momento  $M_2(t)$  para duas condições iniciais distintas foi investigada. Devido à dependência do segundo momento da distribuição de energia com a fração de modos vibracionais estendidos, o transporte energético na presença de correlações torna-se mais rápido. A excitação tipo impulso apresentou um comportamento super-difusivo ( $M_2(t) \sim t^{3/2}$  até  $M_2(t) \sim t^{11/6}$ ) respectivamente para desordem não correlacionada e correlações tipo trímeros. A evolução do pacote energético inicialmente excitado através de deslocamento de massas propicia uma dinâmica sub-difusiva ( $M_2 \sim t^{0.6}$ )

em razoável concordância com resultados previstos analiticamente ( $M_2 \sim t^{0.5}$ ). Uma descrição numérica do transporte energético em cadeias com correlações de longo-alcance na desordem foi apresentado na referência [50]. Os autores construíram uma distribuição de massas desordenadas que apresenta um espectro de potência  $1/k^\alpha$ . Para  $\alpha > 1$  foi encontrado um transporte balístico, independente da condição inicial do pulso energético. Também foi numericamente demonstrado que a existência deste comportamento balístico está relacionada à presença de modos vibracionais estendidos num intervalo finito de frequências. Transporte energético balístico foi também encontrado em cadeias harmônicas aperiódicas [66]. Os efeitos da presença de anarmonicidade sobre os modos normais e a condutividade térmica de cadeias harmônicas e anarmônicas com massas aleatórias não correlacionadas [67] e também de cadeias com massas alternadas [68, 69] foram numericamente investigadas. A dependência da condutividade com o tamanho da cadeia e o valor da condutividade térmica no limite termodinâmico são questões que permanecem controversas [70].

Os modos normais de vibração em cadeias harmônicas podem ser mapeados exatamente nos auto-estados de um elétron em modelos com Hamiltoniano do tipo *tight-binding*. Este mapeamento pode ser facilmente demonstrado, considerando uma cadeia harmônica com  $N$  átomos acoplados através de uma força elástica dada por:

$$F = \beta_{n,m}(u_m - u_n) \quad (3.1)$$

onde  $\beta_{m,n}$  é a constante elástica da força entre os sítios  $m$  e  $n$  e  $u_n$  é a posição do átomo  $n$ . Neste modelo, a desordem pode ser introduzida de duas formas: colocando uma distribuição aleatória de massas ou introduzindo uma distribuição aleatória de constantes elásticas  $\beta_{m,n}$ . As equações de movimento para um arranjo unidimensional de massas  $m_i$ , com  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ , acopladas por forças harmônicas são dada por:

$$m_n \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = \beta_{n-1}(u_{n-1}(t) - u_n(t)) + \beta_n(u_{n+1}(t) - u_n(t)). \quad (3.2)$$

Supondo uma dependência temporal harmônica com apenas uma frequência ( $u_n(t) = u_n \exp(-i\omega t)$ ) as equações 3.2 podem ser escritas como:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)u_n = \beta_{n-1}u_{n-1} + \beta_n u_{n+1} \quad (3.3)$$

onde  $\omega$  é a frequência do modo e  $u_n$  é a transformada de Fourier temporal do deslocamento da  $n$ -ésima massa. Em 1972, P. Dean, propôs um mapeamento dessas cadeias harmônicas em um modelo *tight-binding* eletrônico, fazendo a seguinte mudança de variável:

$$u_n = \frac{c_n}{n^{1/2}}. \quad (3.4)$$

Usando essa expressão nas equações 3.3, temos que:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n) \frac{c_n}{m_n^{1/2}} = \beta_{n-1} \frac{c_{n-1}}{m_{n-1}^{1/2}} + \beta_n \frac{c_{n+1}}{m_{n+1}^{1/2}} \quad (3.5)$$

Multiplicando ambos os membros de 3.5 por  $1/m_n^{1/2}$ , temos:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n) \frac{c_n}{m_n} = \beta_{n-1} \frac{c_{n-1}}{m_{n-1}^{1/2} m_n^{1/2}} + \beta_n \frac{c_{n+1}}{m_{n+1}^{1/2} m_n^{1/2}} \quad (3.6)$$

O mapeamento pode ser feito de forma explícita, definindo as seguintes transformações:

$$V_{n-1,n} = -\frac{\beta_{n-1}}{\sqrt{m_{n-1}m_n}}, \quad (3.7)$$

$$V_{n,n+1} = -\frac{\beta_n}{\sqrt{m_n m_{n+1}}}, \quad (3.8)$$

$$\epsilon_n = \frac{\beta_{n-1} + \beta_n}{m_n}, \quad (3.9)$$

e

$$E = \omega^2. \quad (3.10)$$

Fazendo a substituição das equações eq. 3.7, 3.8, 3.9 e 3.10 no conjunto de equações 3.6, temos:

$$t_{n,n-1}c_{n+1} + t_{n-1,n}c_{n-1} = (E - \epsilon_n)c_n, n = 1, 2, 3, \dots N \quad (3.11)$$

que é equivalente a equação para o modelo eletrônico *tight-binding*. Note, entretanto, que os parâmetros *tight-binding* equivalentes adquirem correlações que não estão presentes nos parâmetros do problema da cadeia harmônica original. Esse fato faz com que a natureza das excitações coletivas em cadeias harmônicas desordenadas seja fundamentalmente distinta daquela do problema eletrônico com desordem não correlacionada. Em particular, os modos vibracionais apresentam comprimento de localização divergindo no regime de baixas frequências, no qual a densidade de estados apresenta uma singularidade, características que não estão presentes no problema eletrônico.

## 3.2 A Matriz de transferência em uma dimensão e o expoente de Lyapunov

O expoente de Lyapunov também pode ser usado neste caso como uma medida do grau de localização dos modos normais de vibração. Uma das formas mais eficientes e práticas de calcular numericamente o expoente de Lyapunov é através da técnica da matriz de transferência. Podemos reescrever a equação 3.3 de uma forma mais elegante, usando uma representação matricial. Assim, temos

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

onde  $T_n$  é a matriz de transferência dada por:

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n}{\beta_n} & -\frac{\beta_{n-1}}{\beta_n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Para uma dada frequência  $\omega$ , a amplitude de Fourier do deslocamento  $u_N(\omega)$  do  $N$ -ésimo átomo, pode ser obtida através da matriz de transferência, em função das amplitudes dos deslocamentos dos átomos iniciais  $u_0$  e  $u_1$ :

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = T_N T_{N-1} \dots T_1 \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Desta forma, podemos ainda obter o inverso do comprimento localização  $\lambda$  ou expoente de Lyapunov  $\gamma$ , dado por:

$$\gamma = \lambda^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|C_N|}{|C_0|} \quad (3.15)$$

onde

$$C_N = \prod_{n=1}^N T_n C_0 \quad (3.16)$$

e

$$C_0 = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

A expressão acima para o expoente de Lyapunov assume implicitamente o decaimento exponencial dos modos normais o que é verdade para os auto-valores do produto de matrizes aleatórias não correlacionadas.

### 3.3 A densidade de estados

O natureza dos modos vibracionais em um sistema harmônico pode ser indiretamente analisada estudando a densidade de estados (DOS). Estados vibracionais estendidos apresentam uma densidade de estados sem flutuações ao longo do espectro devido ao fenômeno da repulsão entre os níveis. Por outro lado, a DOS é bastante rugosa para modos vibracionais localizados, uma vez que estes são espacialmente separados e portanto não repelem uns aos outros. Vamos apresentar o método de Dean [45], baseado no teorema dos auto-valores negativos, para o cálculo da densidade de estados. Este teorema estabelece que o número de auto estados com auto-valores menores ou iguais a  $\omega^2$  é igual ao número de mudanças de sinal da função  $h_i$ , dada por:

$$h_{i+1} = A_i - \omega^2 - \frac{B_i^2}{h_i}, i = 1, 2, 3, \dots, N - 1 \quad (3.18)$$

onde

$$h_1 = A_1 - \omega^2, \quad (3.19)$$

$$A_i = 2/m_i, \quad (3.20)$$

$$B_i = 1/\sqrt{m_{i-1}m_i}, \quad (3.21)$$

e

$$h_i = \frac{u_i}{m_{i-1}u_{i-1}} \quad (3.22)$$

A definição de  $h_1$  na equação 3.18, significa que a massa do átomo na posição  $i = 0$  é infinita, ou seja, que a cadeia é fixa nesta extremidade. Aplicando este procedimento de forma recursiva, obtemos a densidade de estados integrada. Portanto, após uma derivação numérica podemos obter a densidade de estados.

### 3.4 Modos vibracionais em uma cadeia harmônica com desordem diluída

Nesta seção, apresentaremos nossos estudos sobre cadeias harmônicas com desordem diluída. Modelos com desordem diluída tem atraído um grande interesse da comunidade científica. Basicamente a desordem diluída pode ser gerada introduzindo-se um átomo de massa constante  $m_0$  entre dois átomos de uma rede desordenada. Portanto um sistema com desordem diluída consiste de duas redes interpenetrantes, uma desordenada e a outra cristalina. Recentes trabalhos [19, 16, 18] demonstraram analiticamente e numericamente a existência de estados de Bloch em sistemas eletrônicos unidimensionais com desordem diluída. Além disso, uma dinâmica anômala extremamente dependente da posição inicial do pacote eletrônico foi encontrada. Aqui vamos construir uma cadeia harmônica com desordem diluída sobrepondo uma cadeia harmônica desordenada com  $N/2$  massas e uma cadeia harmônica pura com  $N/2$  massas. Entre cada par de massas aleatórias da cadeia harmônica desordenada é introduzida uma massa cujo valor é o mesmo para todos os átomos da sub-rede diluída. Em nossos cálculos, vamos considerar que as constantes da força elástica de acoplamento  $\beta_n = 1$ , para todos os acoplamentos na cadeia. Desta forma, o sistema de equações de movimento para este modelo é dado por:

$$(2 - \omega^2 m_n)u_n = u_{n-1} + u_{n+1} \quad (3.23)$$

onde  $n = 1, 2, 3, \dots, N$ . A matriz de transferência para esse modelo é dada por:

$$T_n = \begin{pmatrix} 2 - m_n \omega^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Nós obtivemos a densidade de estados usando o método de Dean. Na fig.3.1 apresentamos a densidade de estados normalizada em função da frequência quadrada

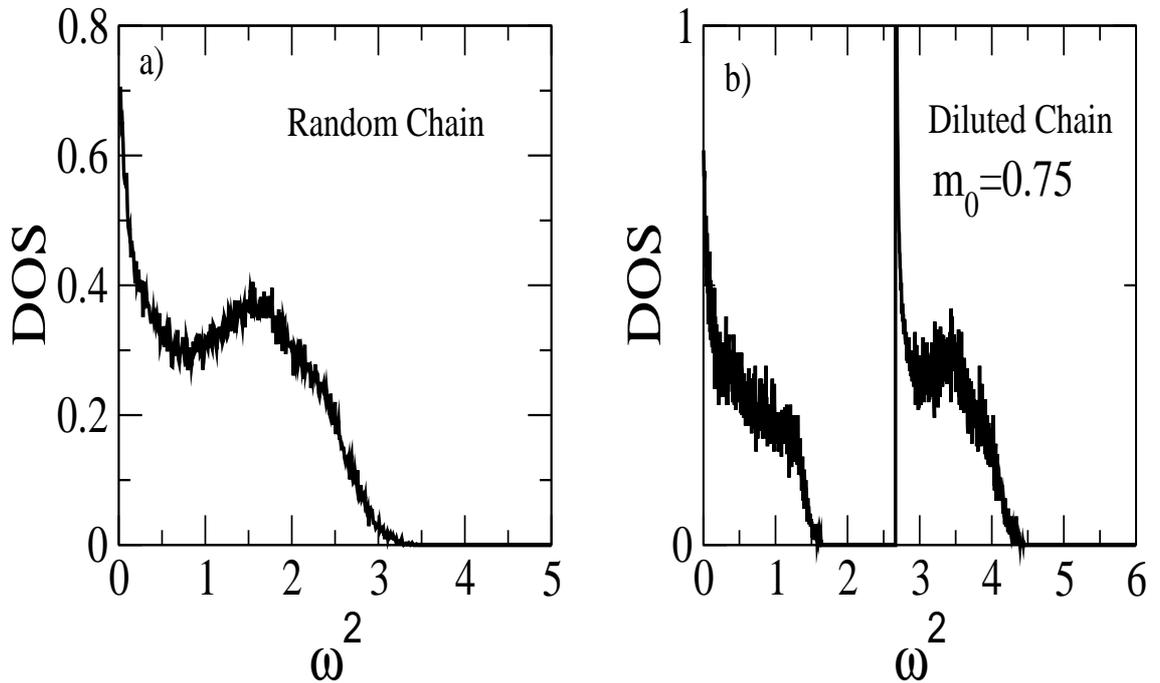


Figura 3.1: Densidade de estados normalizada (*DOS*) como função de  $\omega^2$  obtida usando o método de Dean para uma cadeia com  $10^5$  sítios: (a) cadeia harmônica com massas uniformemente distribuídas no intervalo  $[1,3]$  (b) cadeia harmônica diluída com  $m_0 = 0.75$ . A densidade de estados apresenta *pseudo-gaps* para  $m_0 \neq \langle m_n \rangle$ , que é remanescente do *gap* que aparece na cadeia diatômica periódica.

$\omega^2$  para uma cadeia de  $10^5$  sítios. Fortes flutuações na densidade de estados indicam a presença de estados localizados, enquanto que uma densidade de estados suave está usualmente relacionada à emergência de estados estendidos [47]. Na figura 3.1a, a densidade de estados foi obtida para uma cadeia harmônica aleatória, com as massas cujos valores foram distribuídos uniformemente no intervalo  $[1,3]$ . Na figura 3.1b, calculamos a densidade de estados após diluir a cadeia harmônica desordenada do item (a) com uma massa  $m_0 = 0.75$ . Observamos que a densidade de estados neste caso sempre apresenta um *pseudo-gap* se  $m_0 \neq \langle m_n \rangle$ . O *pseudo-gap* encontrado na cadeia diluída é remanescente do *gap* existente na cadeia diatômica periódica. Note que nas proximidades das singularidades, a *DOS* apresenta pequenas flutuações indicando que estes modos devem ter grandes comprimentos de localização.

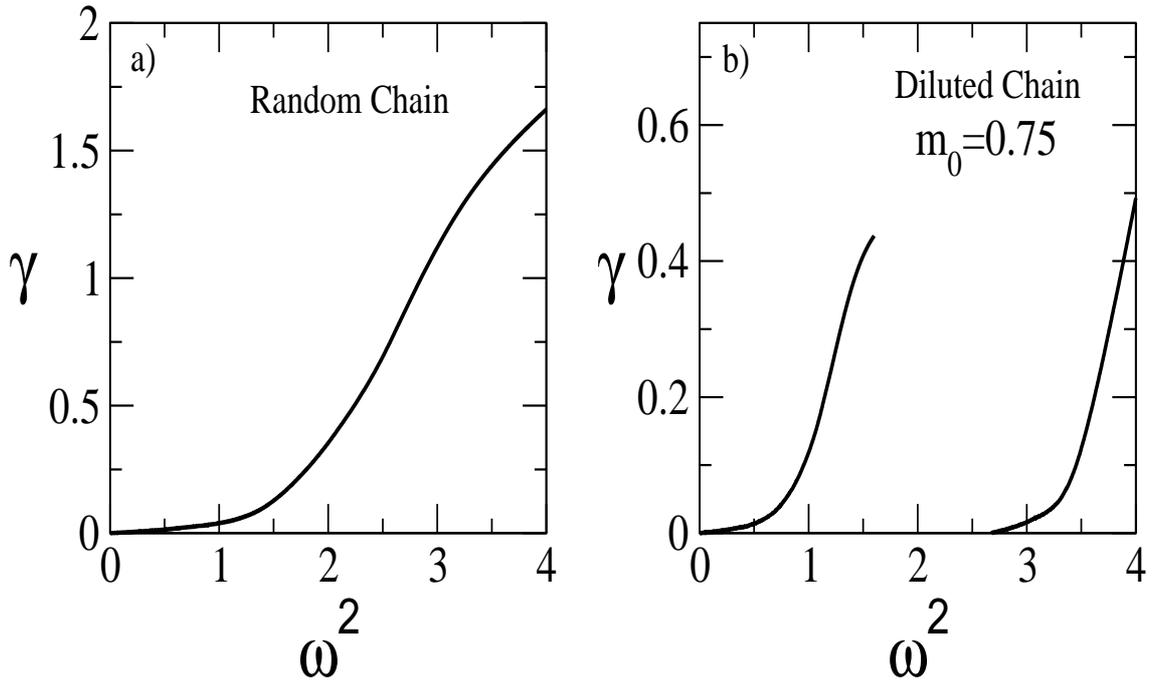


Figura 3.2: *Expoente de Lyapunov, como função de  $\omega^2$  obtido pelo método da matriz de transferência em uma cadeia com  $5 \times 10^5$  sítios: (a) cadeia harmônica aleatória com massas uniformemente distribuídas no intervalo  $[1,3]$  (b) cadeia harmônica diluída com  $m_0 = 0.75$ . Este gráfico mostra claramente o novo estado ressonante em  $\omega > 0$ , induzido pela diluição da distribuição de desordem.*

Na figura 3.2, apresentamos o expoente de Lyapunov  $\gamma$  em função de  $\omega^2$  utilizando  $10^5$  matrizes de transferência para (a) cadeia harmônica com massas uniformemente distribuídas no intervalo  $[1,3]$  e (b) cadeia harmônica diluída equivalente a 3.1b. Devido a desordem diluída, o sistema apresenta um novo estado estendido em  $\omega > 0$ . Próximo a essa frequência crítica,  $\gamma$  vai a zero como  $\gamma \sim (\omega - \omega_c)$ . A frequência desses modos vibracionais estendidos está exatamente na singularidade da densidade de estados (DOS).

### 3.5 Transporte de energia

Neste ponto, uma questão relevante diz respeito à possível modificação das propriedades de transporte de energia em cadeias diluídas devido à presença de modos vibracionais estendidos em alta frequência. Para tentar responder a esta questão, investigamos a evolução temporal de um pulso de energia inicialmente localizado através do cálculo do segundo momento da distribuição de energia [49, 71]. Esta quantidade está relacionada à condutividade térmica pela fórmula de Kubo [49]. O Hamiltoniano clássico para uma cadeia harmônica pode ser escrito como:

$$H = \sum_{n=1}^N h_n(t) \quad (3.25)$$

onde  $h_n(t)$  é a energia no sítio  $n$  dada por:

$$h_n(t) = \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{\beta_n}{4} [(Q_{n+1} - Q_n)^2 + (Q_{n-1} - Q_n)^2] \quad (3.26)$$

Nesta equação,  $P_n$  e  $Q_n$  definem respectivamente o momento e o deslocamento da massa no  $n$ -ésimo sítio. A fração da energia total  $H$  no sítio  $n$  é dada por  $\frac{h_n(t)}{H}$  e o segundo momento da distribuição de energia é definido por [49]:

$$M_2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 \left[ \frac{h_n(t)}{H} \right] \quad (3.27)$$

onde a excitação inicial é introduzida no sítio  $n_0$  em  $t = 0$ . Usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem, resolvemos as equações de movimento de Hamilton para este sistema:

$$\dot{P}_n(t) = -\frac{\partial H}{\partial Q_n} = \beta_n [(Q_{n+1} - Q_n) - (Q_n - Q_{n-1})] \quad (3.28)$$

e

$$\dot{Q}_n(t) = -\frac{\partial H}{\partial P_n} = \frac{P_n(t)}{m_n} \quad (3.29)$$

O segundo momento da distribuição de energia  $M_2(t)$  tem o mesmo significado do deslocamento quadrático médio de um pacote de onda eletrônico em um sólido [49]. Em cadeias harmônicas com excitação inicial por impulso, a largura do pulso de energia cresce de forma super-difusiva [ $M_2 \sim t^{3/2}$ ] contrastando com o alargamento sub-difusivo ( $M_2 \sim t^{1/2}$ ) de uma excitação inicial por deslocamento [49, 71].

A origem desses comportamentos assintóticos distintos, vem da forma como os modos normais de vibração são populados por essas diferentes espécies de excitação inicial. No caso de excitações por impulso, os modos são populados uniformemente. Por outro lado, a contribuição de um modo vibracional de frequência  $\omega$  é proporcional a  $\omega^2$  para excitação por deslocamento [49]. Desta forma, os modos de baixas energias, que são efetivamente estendidos, desempenham papéis distintos nestes dois casos. A fraca contribuição destes modos estendidos para excitação por deslocamento resulta em uma expansão da energia de forma mais lenta.

Na figura 3.3, nós mostramos o segundo momento da distribuição de energia,  $M_2(t)$  em função do tempo  $t$  para uma cadeia harmônica unidimensional com  $m_0 = 1$  e  $N = 1.5 \times 10^4$  sítios. As massas aleatórias foram escolhidas no intervalo de [0.5,3.5]. Nós consideramos dois tipos de excitação inicial: em (a) a excitação inicial foi por deslocamento e em (b) a excitação inicial foi por impulso. A excitação inicial foi posta no sítio  $n_0$ , próximo ao centro da cadeia. A dinâmica assintótica no caso da excitação inicial por impulso resultou em  $M_2(t) \sim t^{1.5}$  ou seja, o comportamento super-difusivo usual em sistemas com desordem descorrelacionada. Entretanto, para o caso da excitação inicial por deslocamento no sítio da cadeia diluída, a energia se expande de forma difusiva, ou seja:

$$M_2(t) \sim t^1. \quad (3.30)$$

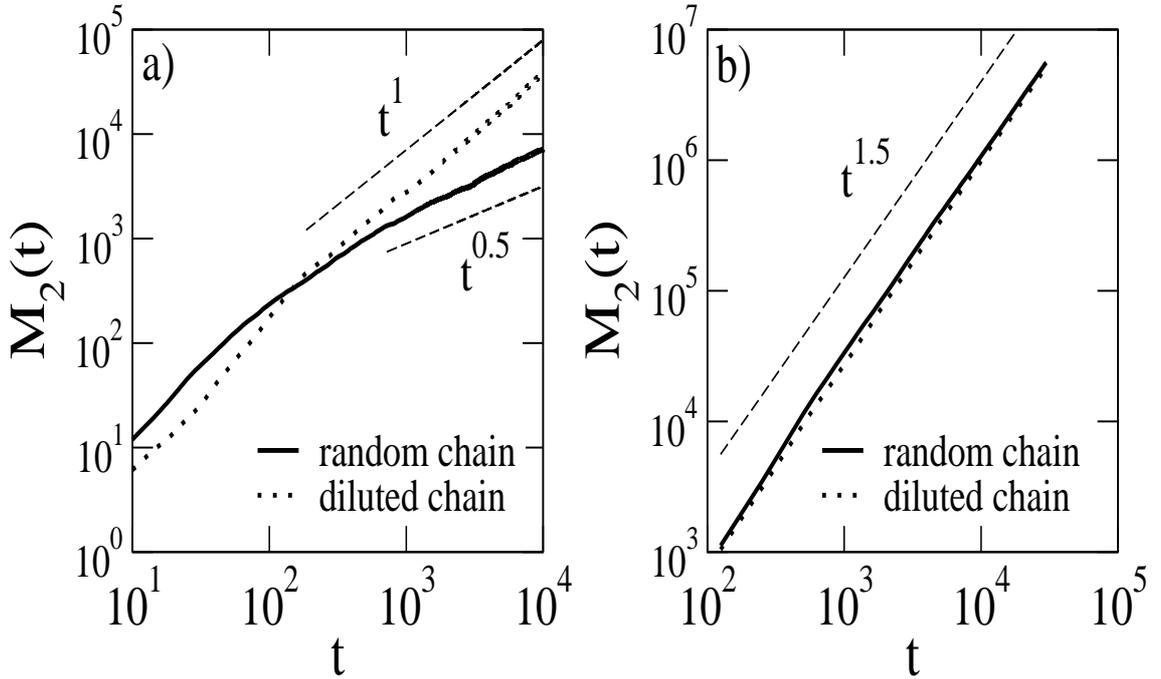


Figura 3.3: Segundo momento da distribuição de energia  $M_2(t)$  em função do tempo, para uma cadeia harmônica diluída com  $m_0 = 1.0$  e  $N = 1.5 \times 10^4$  sítios. As massas aleatórias foram escolhidas dentro do intervalo  $[0.5, 3.5]$ . Nós consideramos duas espécies de condições iniciais: (a) Excitações por deslocamento e (b) excitações por impulso. As linhas sólidas correspondem às expansões das excitações em uma cadeia não diluída

Este resultado contrasta com o modelo usual de massas com desordem descorrelacionadas onde a expansão ocorre de forma sub-difusiva  $M_2(t) \sim t^{0.5}$ .

Em resumo, nós estudamos a natureza das excitações coletivas em cadeias harmônicas com desordem diluída. Neste modelo, sítios de massa constante  $m_0$  intercalam sítios de massas aleatórias com distribuição uniforme. Este modelo apresenta um modo harmônico estendido na frequência  $\omega_c$ , com deslocamento nulo nas massas aleatórias. O expoente de Lyapunov zera linearmente quando a frequência se aproxima da frequência de ressonância. Além disso, a densidade de estados apresenta uma singularidade divergente na frequência de ressonância. Nós mostramos que a presença deste modo ressonante pode modificar a expansão de uma excitação

---

inicialmente localizada. Através do cálculo do segundo momento da distribuição espacial da energia  $M_2(t)$ , nós encontramos que uma excitação inicial por impulso se expande de forma super-difusiva  $M_2(t) \sim t^{1.5}$ , mesmo na presença da diluição. Por outro lado, a expansão de uma excitação inicial por deslocamento é fortemente afetada pela diluição, mudando de um comportamento sub-difusivo [ $M_2(t) \sim t^{1/2}$ ], na ausência de diluição para uma difusão mais rápida [ $M_2(t) \sim t^1$ ]. Desta forma, a presença de novos modos de vibração estendidos e a expansão mais rápida da energia, pode ser relevante para a condutividade térmica de cadeias harmônicas com desordem diluída.

## Capítulo 4

# Transição de percolação para cadeias unidimensionais, com ligação de longo-alcance para os casos clássico e quântico

O problema da percolação clássica é um problema puramente geométrico, onde o comportamento crítico refere-se ao fato de haver ou não uma conectividade entre dois extremos de uma rede diluída. A diluição pode ser por sítio ou por ligação. O parâmetro de controle é a probabilidade  $p$  de um sítio ou ligação estar presente na rede. Quando um grupo de vizinhos em determinada rede diluída são sítios ocupados ou possuem ligações entre eles, então este grupo é denominado de um aglomerado (*cluster*). Caso, para uma determinada probabilidade de ocupação  $p$ , um *cluster* conecte um extremo ao outro da cadeia, então diz-se que ocorreu uma percolação no sistema. O valor extremo não nulo de  $p$ , para o qual ocorre uma percolação, é denominado de limiar de percolação e depende da dimensão e geometria da rede,

crescendo com o número de primeiros vizinhos. Este modelo simples é capaz de explicar uma série de fenômenos físicos como fluxo de fluidos em meios porosos, resistores aleatórios, magnetos diluídos e muitos outros.

O modelo de percolação é um modelo de sistema de partículas não-interagentes que apresenta uma transição de fase não usual, onde não há temperatura. Apesar disto, este modelo pode ser mapeado num modelo de Potts com  $q$  estados, no limite do número de estados  $q \rightarrow 1$  e, sendo assim, pode ser associado a um fenômeno crítico térmico [72]. Como em todo fenômeno crítico usual, o problema da percolação possui um parâmetro de ordem e a transição pode ser caracterizada por um conjunto de expoentes críticos, com o diferencial de que as quantidades termodinâmicas são agora relacionadas às propriedades geométricas dos *clusters*. No caso da percolação, o parâmetro de ordem da transição é a probabilidade  $P(p)$  de um sítio ou ligação, escolhido(a) aleatoriamente, pertencer ao *cluster* percolante. Esta quantidade vai a zero continuamente, nas proximidades do limiar de percolação, com um expoente  $\beta$ . Para fazer o análogo à susceptibilidade magnética em sistemas magnéticos, tem-se o tamanho médio do *cluster*  $S(p)$ . Esta quantidade diverge com um expoente  $\gamma$  nas proximidades do ponto crítico. A correlação de dois pontos está relacionada, no caso da percolação, à conectividade  $g(r)$ , que é a probabilidade de que dois pontos na rede, com distância relativa  $r$ , pertencerem ao mesmo *cluster*. À medida que o tamanho do *cluster* cresce,  $g(r)$  decai exponencialmente com a distância relativa. O comprimento de correlação, que caracteriza a queda exponencial, diverge nas proximidades do ponto crítico de acordo com  $|p - p_c|^{-\nu}$ , onde  $p_c$  representa o ponto crítico. Todos os outros expoentes críticos da percolação são construídos de forma semelhante, como é feito para sistemas térmicos.

Com base nas propriedades de escala e universalidade do problema da percolação geométrica é possível mostrar que são necessários dois expoentes críticos para caracterizar esta transição. O *cluster* infinito ou *cluster* percolante em  $p = p_c$ ,

para um sistema de dimensão  $d$ , é um fractal caracterizado pela dimensão fractal  $d_f = (d - \beta/\nu)$ . As propriedades de transporte em sólidos geometricamente desordenados também têm sido estudadas e a condutividade comporta-se como:

$$\sigma(p) \propto |p - p_c|^{-t} \quad (4.1)$$

próximo ao ponto crítico.

Mesmo a percolação clássica sendo muito utilizada para explicar uma série de fenômenos, esta teoria falha quando aspectos quânticos começam a aparecer como, por exemplo, o fenômeno da localização da função de onda. Em fenômenos tais como a supercondutividade e transporte eletrônico em materiais amorfos, a utilização do conceito de percolação quântica torna-se indispensável para a descrição correta do problema.

Em cadeias unidimensionais com conexões apenas entre primeiros vizinhos ou, de forma mais geral, com conexões de curto alcance, qualquer fração de diluição de sítios ou ligações impede o surgimento de um cluster percolante. Por outro lado, em cadeias com ligações de longo-alcance, uma transição de percolação pode ocorrer para um valor finito da probabilidade de ocupação  $p$ . Estes modelos têm sido amplamente explorados na literatura e a classe de universalidade da percolação clássica tem sido objeto de algum debate [73, 74, 75].

Neste capítulo serão estudados dois problemas de percolação em uma dimensão, sendo eles o problema da percolação clássica e o outro o problema da percolação quântica levando em conta que pode haver ligações de longo-alcance. Serão obtidos os diagramas de fase de ambos os casos bem como uma análise de tamanho finito para caracterizar melhor essa transição em  $T = 0$ .

## 4.1 Percolação clássica

A transição de fase que ocorre em sistemas com interações que decaem com uma lei de potência é um assunto de muito interesse devido a seu comportamento crítico único. Para sistemas de dimensão  $d$ , com um parâmetro de ordem de  $n$  componentes e interações de longo-alcance que decaem como  $\sim 1/r^{\sigma+d}$ , técnicas como grupo de renormalização e expansão em série de potências em  $\epsilon = 2\sigma - d$  têm estabelecido que os expoentes críticos assumem valores independentes de  $d$  e  $n$  para  $0 < \sigma < d/2$ , cujos valores são dados por  $\eta = 2 - \sigma$  para o expoente da função de correlação e  $\nu = 1/\sigma$  para o expoente do comprimento de correlação [76]. Para  $\sigma > 2$  permanecem válidos os expoentes clássicos de curto alcance. No regime intermediário  $d/2 < \sigma < 2$ , os expoentes dependem da dimensão da rede e da dimensionalidade do parâmetro de ordem (valores não clássicos). A expansão em série até segunda ordem em  $\epsilon$  é conhecida.

Uma característica interessante é que o expoente  $\eta$  da função de correlação parece permanecer em seu valor clássico e esse resultado vem sendo aceito para todas as ordens em  $\epsilon$ , embora tenha sido demonstrado apenas até a segunda ordem. Em adição aos interesses teóricos no rico comportamento crítico de sistemas com interações decaindo como lei de potência, forças de longo-alcance e acoplamentos de longo-alcance vêm sendo usados para descrever vários fenômenos físicos tais como transição de vidros de spin [77], criticalidade em sistemas iônicos [78], o problema de Kondo [79], efeito Casimir em sistemas fortemente correlacionados [80], modelamento de sistemas neurais [81], calor específico negativo em gás tipo Lennard Jones [82] e redes complexas [83].

No caso particular de modelos unidimensionais, com interações de longo-alcance, não existe transição caso  $\sigma > 1$ . Desta forma, o regime de comportamento crítico não clássico é restrito à faixa  $1/2 < \sigma < 1$ . Em  $\sigma = 1/2$  o comportamento crítico exhibe correções logarítmicas para o caso clássico. O caso oposto de  $\sigma = 1$

tem sido tema de intensas investigações [84, 85, 86, 87].

Em modelos onde as variáveis locais possuem um contínuo de estados, a temperatura crítica vai a zero continuamente quando  $\sigma \rightarrow 1$  [88]. Por outro lado, modelos unidimensionais com interações decaindo com inverso do quadrado da distância e variáveis locais com um número finito de estados apresentam uma transição ordem-desordem em uma temperatura finita para  $\sigma = 1$ . Foi demonstrado que esta transição pertence à classe de transições de fase topológica tipo Kosterlitz-Thouless (KT) que ocorre no modelo  $XY$  em duas dimensões [84]. O comprimento de correlação tem uma divergência exponencial nas proximidades da temperatura crítica e o parâmetro de ordem salta descontínuamente para zero. O modelo de Potts de  $q$ -estados é um exemplo instrutivo onde espera-se que ocorra uma transição tipo Kosterlitz-Touless para qualquer valor de  $q \geq 2$ . Embora um cálculo baseado na teoria de grupo de renormalização no espaço real tenha apresentado um resultado preliminar indicando que a temperatura de transição  $T_c$  seria a mesma para qualquer valor de  $q$  [89], resultados numéricos mais recentes mostram que  $T_c$  é uma função decrescente do número de estados  $q$  [87]. Para decaimentos mais suaves, ou seja, para  $\sigma < 1$ , a transição pode tornar-se de primeira ordem [90], com  $\sigma_c(q) < 1$  para todo  $q$  [91].

O modelo correspondente para estudar a transição de percolação geométrica em sistemas diluídos aleatoriamente, com concentração de ligação decaindo como uma lei de potência tipo  $\sim 1/r^{1+\sigma}$  foi introduzido a mais de duas décadas atrás [92]. Inicialmente conjecturou-se que um *cluster* infinito estaria presente para qualquer concentração finita de ligações no caso de  $\sigma < 1$  [92]. No entanto, foi mostrado que essa conjectura falha e que não pode haver *cluster* de percolação para  $p < 1/\zeta(\sigma)$ , onde  $\zeta(\sigma)$  é a função zeta de Riemann [73]. Foi demonstrado que pode haver uma transição entre um regime percolante e um regime não percolante caso  $\sigma < 1$  [74]. No caso limite de  $\sigma = 1$ , argumentou-se a existência de uma fase intermediária com

correlações que decaem suavemente e uma descontinuidade na densidade de percolação [86, 85]. Mais recentemente, o comportamento de escala da menor distância entre dois pontos [93, 94] e o problema da caminhada aleatória [95] em percolação de longo-alcance têm sido analisados. Entretanto, exceto pela estimativa numérica feita por Rego *et. al* [96], não foi obtida uma estimativa precisa do diagrama de fase da transição de percolação para este modelo.

Nesta seção, exploraremos o comportamento de escala fractal do maior *cluster* no limiar de percolação para obter uma estimativa precisa do ponto crítico do problema da percolação com ligações de longo-alcance em uma dimensão. A análise de escala será baseada na existência de muitos *clusters* infinitos na transição, sendo que todos eles possuem a mesma dimensão fractal [97, 98]. Esta característica permite o uso razão média das massas como variável de escala de expoente nulo, para localizar o ponto crítico através de simulações numéricas sobre redes relativamente pequenas [99]. Esta estratégia foi aplicada com sucesso para o problema da percolação em hiper-cubos de dimensão  $d$ , dando uma estimativa precisa para o limiar de percolação para  $2 \leq d \leq 7$  bem como várias distribuições de massa relevantes associadas aos dois maiores *clusters* [100]. Nesta tese, além de fornecer a linha crítica  $p_c(\sigma)$ , mostraremos a razão média das massas críticas do segundo maior *cluster* e do maior *cluster*  $\langle M_2/M_1 \rangle$ ,  $\langle M_2 \rangle / \langle M_1 \rangle$ , bem como a dimensão fractal do maior *cluster*  $d_f(\sigma)$ . Para valores extremos do expoente de decaimento da lei de potência  $\sigma$ , uma técnica numérica de grupo de renormalização será feita para refinar a estimativa do ponto crítico.

### 4.1.1 Modelo de percolação clássica de longo-alcance e comportamento de escala fractal

Consideramos um modelo de percolação de longo-alcance em  $d = 1$  numa cadeia fechada contendo  $N$  sítios. Para cada par de sítios  $(i, j)$ , a probabilidade de

haver uma ligação é definida por:

$$p(r) = p/r^{1+\sigma}, \quad (4.2)$$

onde  $r$  é a distância entre este par de sítios e  $p$  é a concentração de ligações entre primeiros vizinhos assumindo valores entre 0 e 1. Quando somente as conexões de curto alcance são permitidas, um *cluster* infinito contendo uma fração finita da cadeia não existe para qualquer  $p < 1$ . Este quadro permanece válido sempre que o expoente da lei de potência  $\sigma > 1$ . Para  $\sigma < 1$ , um *cluster* infinito emerge para concentrações  $p$  acima de uma concentração crítica  $p_c(\sigma)$ , devido à alta conectividade induzida pelo acoplamento de longo-alcance. Para  $\sigma < 0$ , haverá um *cluster* percolante com uma densidade finita para qualquer valor não nulo de  $p$ . Desta forma, no regime  $0 < \sigma < 1$  pode ocorrer uma transição de percolação contínua.

Um modelo mais geral que o descrito anteriormente sobre percolação pode ser encontrado na literatura [86, 73, 74, 85]. Nesta versão a probabilidade de haver uma ligação entre um par de sítios  $(i, j)$  é dada por  $p(i, j) = \beta/r^{1+\sigma}$  para  $r > 1$  e  $p$  refere-se apenas à concentração de ligação entre os primeiros vizinhos. Na região de  $0 < \sigma < 1$ , este modelo também apresenta uma transição contínua. Para o caso limite de  $\sigma = 1$ , foi rigorosamente provado que existe uma descontinuidade na densidade do *cluster* infinito, ocorrendo em  $\beta_c(p) > 1$ , com  $\beta_c$  aproximando-se da unidade quando  $p \rightarrow 1$ . O modelo de percolação geométrica apresentado nesta tese, corresponde a um caso particular onde  $\beta = p \leq 1$  e este fornece uma estimativa da transição de fase contínua que ocorre no intervalo  $0 < \sigma < 1$ . Além disto, também investigaremos o caso em que  $\sigma = 1$  para caracterizar o comportamento de escala no regime não percolante nas vizinhanças da transição de percolação descontínua que ocorre para  $p \rightarrow 1$ . No restante deste capítulo, vamos nos referir a  $p$  como a concentração de ligações entre primeiros vizinhos, mas lembrando que este parâmetro afeta a fração de todas as ligações.

Análises da distribuição de massa dos *clusters* nas vizinhanças da transição de percolação têm sido feitas para obter novas propriedades no ponto crítico [102, 103, 104, 105]. Uma característica interessante é observada, quando os *clusters* formados na criticalidade são dispostos em ordem decrescente de tamanho. No regime de sistemas grandes, a massa média do  $k$ -ésimo maior *cluster* escala como  $\langle M_k \rangle \sim N^{d_f}$ , com a mesma dimensão fractal  $d_f$  em qualquer ordem [97, 98, 102, 106]. Especificamente, o segundo maior *cluster* é proporcional, em massa, ao maior *cluster*, no limiar de percolação. Alguns trabalhos mostraram que a razão média entre as massas do maior *cluster* e o segundo maior *cluster* é invariante por escala no ponto crítico, com seu valor dependendo da geometria da rede e das condições de contorno do modelo [99, 100, 102, 107].

De acordo com a hipótese de escala de tamanho finito, o tamanho médio do maior *cluster* no ponto crítico escala como  $\langle M_1 \rangle \sim N^{d-\beta/\nu}$ . O comportamento de escala permanece o mesmo para  $\langle M_2 \rangle$  [97, 102]. Em consequência, a média da razão entre as massas  $\langle M_2/M_1 \rangle$  comporta-se como uma quantidade crítica de expoente nulo que escala como:

$$\langle M_2/M_1 \rangle = f[(p - p_c)N^{1/\nu}] \quad (4.3)$$

com a função de escala  $f(-\infty) = 1$  e  $f(+\infty) = 0$ . Uma relação de escala similar também é válida para  $\langle M_2 \rangle / \langle M_1 \rangle$ . Levando-se em conta o comportamento de escala descrito anteriormente, essas razões são independentes do tamanho da cadeia no ponto crítico da percolação. Abaixo do ponto de transição, os dois maiores clusters são similares em tamanho e a razão entre as massas expressas em 4.3 aproxima-se da unidade quando o tamanho do sistema cresce. Por outro lado, há uma predominância do maior cluster acima da concentração crítica e a razão entre as massas vai a zero no limite de tamanho infinito. Desta forma, as curvas obtidas dessas razões entre as massas citadas anteriormente, para tamanhos diferentes do sistema, interceptam-se

em um ponto comum, quando posto como função da concentração de ligações [99, 100].

Quando o expoente da lei de potência  $\sigma \rightarrow 0$ , o número de conexões necessárias para criar um *cluster* percolante é reduzido (embora com um caráter de longo-alcance). Neste regime, o *cluster* de percolação tem uma massa pequena. Desta forma, a análise de escala de tamanho finito em conjunto com as propriedades do maior e do segundo maior cluster tornam-se menos eficiente para localizar o ponto crítico do que a hipótese de escala baseada unicamente sobre o maior *cluster*. Esta dificuldade reflete as grandes correções de escala apresentadas pelos *clusters* de ordem mais alta. Para refinar a estimativa dos parâmetros críticos neste regime, uma renormalização numérica pode ser usada, baseada no comportamento do seguinte grupo de funções auxiliares:

$$g(N, N', p) = \frac{\ln \left[ \frac{M_1(N, p)}{M_1(N', p)} \right]}{\ln \left[ \frac{N}{N'} \right]} \quad (4.4)$$

Tais funções são obtidas baseando-se apenas no tamanho do maior *cluster* e, de acordo com a hipótese de escala de tamanho finito, elas interceptam-se em um ponto comum  $g(N, N', p_c) = d_f$  para qualquer par de tamanhos  $(N, N')$ , com possíveis desvios devido a correções de escala. Espera-se que este esquema de grupo de renormalização numérico seja mais preciso em diluições mais altas ( $p \ll 1$ ) devido ao tamanho reduzido do segundo maior *cluster* neste regime. A precisão de tal renormalização fenomenológica, baseada em dados de Monte Carlo, foi primeiramente demonstrada através da investigação da percolação por sítios em uma rede cúbica simples [101].

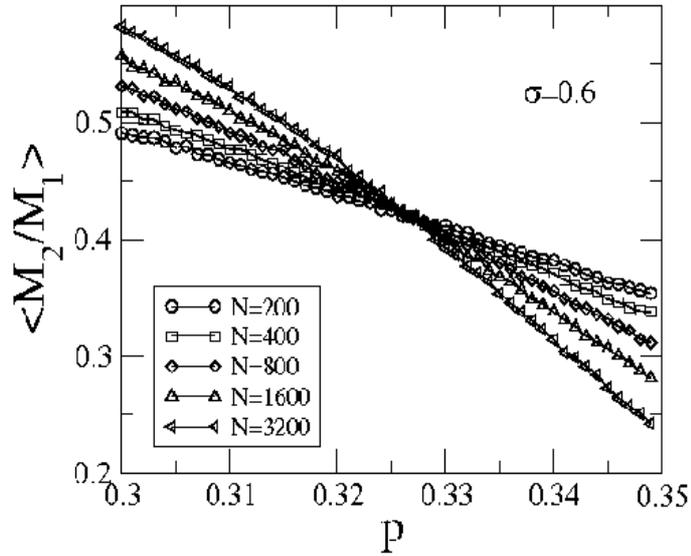


Figura 4.1:  $\langle M_2/M_1 \rangle$  versus  $p$  para  $\sigma = 0.6$ . Os dados foram obtidos para uma média sobre 40000 configurações de desordem. O ponto comum entre as curvas determina  $p_c$ . A razão média das massas, invariante no ponto de percolação, também pode ser obtida deste gráfico

#### 4.1.2 Análise de tamanho finito: diagrama de fases e dimensão fractal

Em nossas simulações, consideramos cadeias de tamanhos que vão desde  $N = 200$  até cadeias com  $N = 3200$ . Para um dado valor do expoente de decaimento  $\sigma$ , medimos o valor médio do tamanho dos dois maiores *clusters* e a razão média entre seus tamanhos como função da concentração de ligações entre primeiros vizinhos  $p$ , sobre 40000 configurações aleatórias das ligações.

A concentração de primeiros vizinhos no ponto crítico  $p_c(\sigma)$  foi obtida através da interseção da razão média das massas  $\langle M_2/M_1 \rangle$  para tamanhos distintos da cadeia e através da interseção do grupo de funções auxiliares  $g(N, N', p)$  (eq 4.4) obtidas da análise de renormalização numérica do tamanho do maior *cluster*, como mostrado nas figuras 4.1 e 4.2. Esses resultados foram obtidos para o caso particular de  $\sigma = 0.6$  para efeito de comparação. Ambos os métodos produziram aproxima-

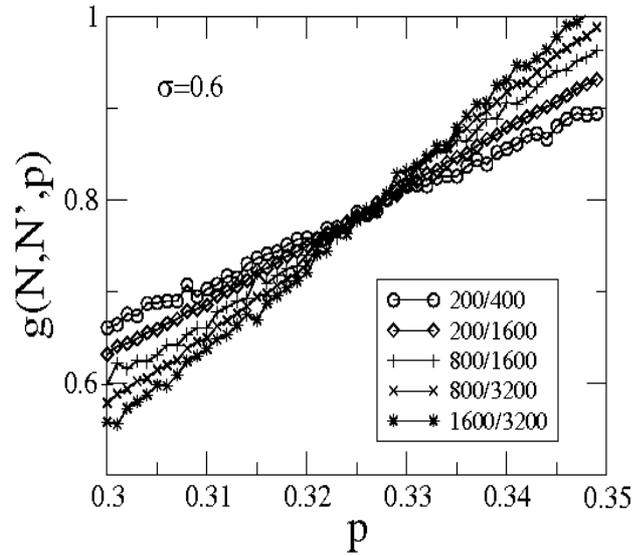


Figura 4.2:  $g(N, N', p)$  versus  $p$  para  $\sigma = 0.6$ . Os dados foram obtidos para uma média sobre 40000 configurações de ligações. O ponto comum entre as curvas determina  $p_c$  e conseqüentemente a dimensão fractal  $d_f$  definida por  $g(N, N', p_c) = d_f$ .

damente a mesma estimativa para a concentração de ligações de primeiros vizinhos no ponto crítico  $p_c(\sigma = 0.6) = 0.327(1)$ . Como a diferença do resultado obtido em ambos os métodos foi muito pequena, as correções de escala são desprezíveis para os tamanhos simulados para este valor específico do expoente da lei de decaimento  $\sigma$ .

A análise descrita anteriormente foi utilizada para obter a linha crítica (linha de transição)  $p_c(\sigma)$  para todo o intervalo  $0 < \sigma < 1$ . Nossos resultados são apresentados na figura 4.3. Como esperado, as estimativas são ligeiramente distintas para valores extremos de  $\sigma$ . O resultado obtido levando-se em conta somente o comportamento de escala do maior *cluster* é considerado mais confiável nesses regimes devido às grandes correções de escala apresentadas pelo tamanho do segundo maior *cluster* em diluições fortes e fracas. Obtivemos que a concentração crítica cresce continuamente em direção a  $p_c(1) = 1$ . Desta forma, o maior cluster permanece finito para qualquer diluição de primeiros vizinhos no caso da lei de decaimento com

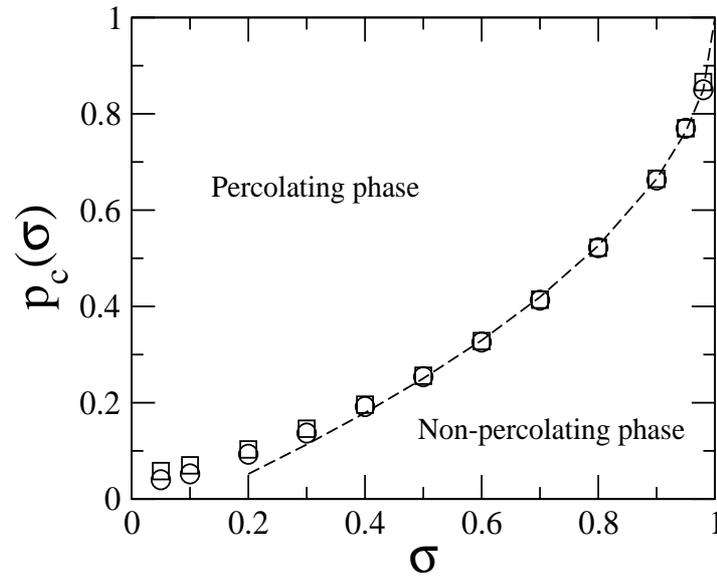


Figura 4.3: Diagrama de fases estimado para o modelo de percolação clássica com concentração de ligações decaindo com uma lei de potência. Os pontos críticos foram estimados do comportamento de escala da razão média dos clusters, assim como pelo método da renormalização numérica do maior cluster (círculos) A linha tracejada representa a curva  $1 - p_c(\sigma) \propto \sqrt{1 - \sigma}$  que fita bem os dados, especialmente quando  $\sigma$  aproxima-se da unidade.

o quadrado da distância para a concentração das ligações. Este fato é consistente com argumentos analíticos prévios, demonstrando que uma fase percolante pode ser observada somente no modelo de percolação de longo-alcance generalizado para  $\beta \geq 1$  [85]. É interessante mencionar que os dados estimados para a concentração crítica podem ser fitados por uma lei de potência simples  $1 - p_c(\sigma) \sim \sqrt{1 - \sigma}$  (linha pontilhada na figura 4.3), especialmente para  $\sigma$  próximo da unidade.

Para caracterizar o comportamento de escala do caso  $\sigma = 1$ , analisamos como a massa média normalizada do maior *cluster* depende do tamanho da cadeia nas vizinhanças de  $p = 1$ . Encontramos que, para diluição fraca do acoplamento de primeiros vizinhos, a razão  $\langle M_1 \rangle / L$  decresce muito suavemente à medida que o tamanho da cadeia cresce, indicando uma convergência logarítmica suave para o limite termodinâmico. De fato, nossos dados para tamanhos distintos da cadeia

foram colapsados em uma função de escala universal da forma:

$$\langle M_1 \rangle / N = f[(1-p)(\ln(N))^{1/2}] \quad (4.5)$$

como mostrado na figura 4.4. Esta lei de escala apoia a ausência de um *cluster* infinito em diluições finitas no limite  $N \rightarrow \infty$ , ou seja  $\langle M_1(p \neq 1, N \rightarrow \infty) \rangle / N \rightarrow 0$ . Por outro lado,  $\langle M_1(p = 1, N \rightarrow \infty) \rangle / N \rightarrow 1$ . É natural ocorrer uma descontinuidade na densidade de percolação em  $p = 1$ , mesmo no modelo de percolação com ligações apenas entre primeiros vizinhos, embora neste caso a forma de escala seja trivial [106]. A análise de tamanho finito, indica uma transição de percolação não trivial, semelhante à transição de Kosterlitz-Thouless, que ocorre em geral no modelo  $XY$  bidimensional. Assim, a descontinuidade indicada da densidade de percolação em  $p = 1$  é remanescente da transição de percolação que ocorre no modelo de percolação de longo-alcance no caso particular em que  $\beta = p = 1$  [85]. A dependência logarítmica da variável de escala revela que a média do tamanho do maior *cluster* cresce exponencialmente quando  $p \rightarrow 1$ , uma vez que o tamanho de escala característico do *cluster* escala como  $\sim e^{(1-p)^2}$ . Esta última característica é consistente com um expoente do comprimento de correlação divergente para essa transição de percolação assintótica.

A dimensão fractal  $d_f$  do *cluster* percolante crítico foi medida a partir do esquema de renormalização numérico e é mostrada como função do expoente de decaimento  $\sigma$ , na figura 4.5. É particularmente interessante notar que, para  $\sigma > 1/2$ , a dimensão fractal é bem fitada por:

$$d_f = (1 + \sigma)/2, \quad (4.6)$$

dentro de nossa precisão numérica. Usando as relações de escala  $d_f = d - \beta/\nu$  e  $2 - \eta = d - 2\beta/\nu$ , a relação de escala apresentada em 4.6, resulta em

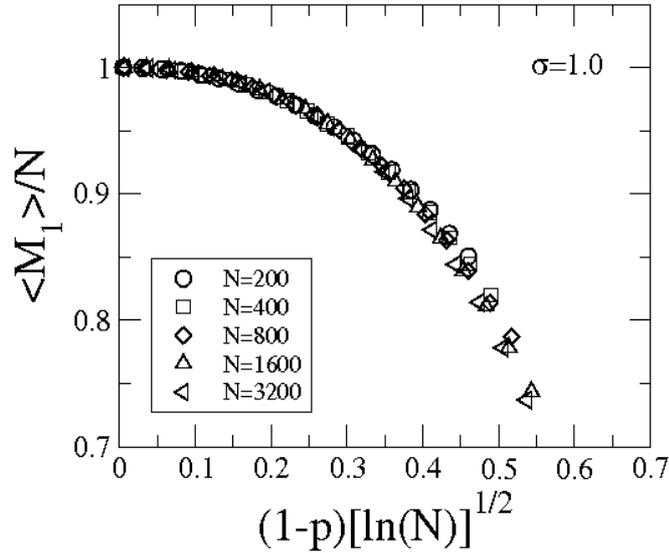


Figura 4.4: Colapso dos dados de cadeias de tamanhos distintos para o caso limite de  $\sigma = 1$ . O tamanho do maior cluster normalizado segue uma função universal de  $(1 - p)(\ln N)^{1/2}$ , indicando desta forma a ausência de um cluster infinito em diluições finitas e o crescimento exponencial do tamanho médio do maior cluster quando  $p \rightarrow 1$ .

$$\eta = (2 - \sigma). \quad (4.7)$$

Esta equação é a relação clássica prevista pelos cálculos de grupo de renormalização para sistemas com interações que decaem como lei de potência [76, 108]. Entretanto, a transição de percolação puramente geométrica estudada aqui desvia da relação clássica quando a concentração de ligações decai mais suavemente que  $1/r^{3/2}$ . Para  $\sigma < 1/2$ , a dimensão fractal parece seguir uma dependência linear distinta dada aproximadamente por:

$$d_f = 0.35 + 4/5\sigma. \quad (4.8)$$

O caso em que  $\sigma = 1/2$  mostra um pequeno desvio da tendência em relação ao comportamento indicado por 4.6, que pode estar relacionado a possíveis correções logarítmicas de escala que não foram consideradas nesta tese.

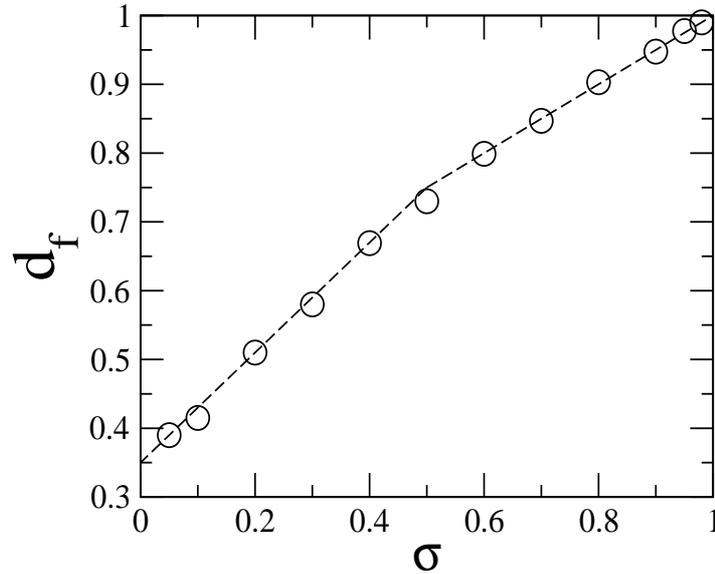


Figura 4.5: *Dimensão fractal do cluster de percolação crítica como função do expoente de decaimento  $\sigma$ . Para  $\sigma > 1/2$  os dados são bem fitados por  $d_f(\sigma) = (1 + \sigma)/2$ , que é similar ao comportamento clássico previsto pela teoria de grupo de renormalização para sistemas cujas interações decaem como uma lei de potência.*

Medimos também a média da razão crítica entre as massas  $\langle M_2/M_1 \rangle$  e  $\langle M_2 \rangle / \langle M_1 \rangle$  como mostrado na figura 4.6. Para concentrações de ligações que decaem lentamente, onde o estado crítico é fortemente diluído em termos de ligações, o maior e o segundo maior *clusters* são aproximadamente iguais em tamanho. Por outro lado, próximo da borda  $\sigma = 1$ , o estado crítico é diluído de forma fraca e o maior *cluster* é muito maior que o segundo maior, mesmo eles tendo a mesma dimensão fractal. O fato de que  $\langle M_2/M_1 \rangle > \langle M_2 \rangle / \langle M_1 \rangle$  reflete as flutuações das razões das massas para distribuições distintas de ligações.

Em resumo, nesta seção mostramos uma análise detalhada de escala de tamanho finito da transição de percolação geométrica, para uma cadeia com densidade de ligações decaindo como  $p(r) = 1/r^{1+\sigma}$ . Explorando o comportamento fractal do maior e do segundo maior *cluster* no limiar de percolação, obtivemos uma boa estimativa para o ponto crítico de percolação e a dimensão fractal da massa do *cluster*

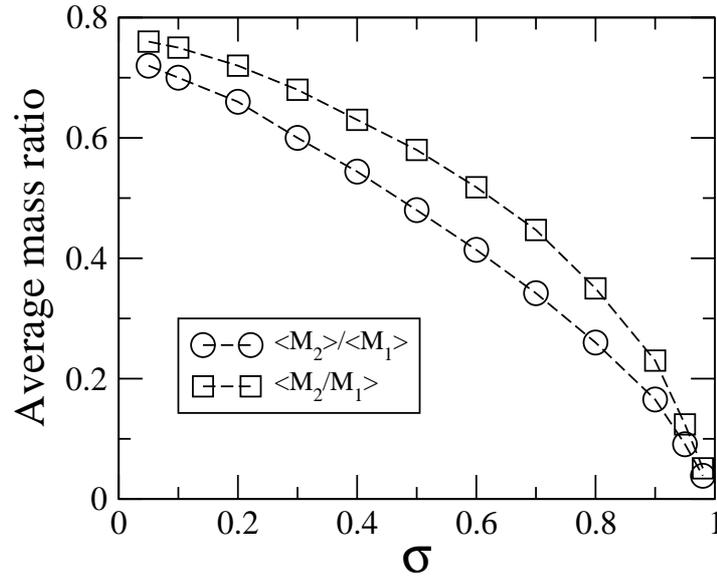


Figura 4.6: O valor crítico da razão média das massas  $\langle M_2/M_1 \rangle$  e  $\langle M_2 \rangle / \langle M_1 \rangle$  como função do expoente de decaimento  $\sigma$ . Estas razões assumem valores pequenos quando o regime de curto alcance se aproxima, uma vez que o cluster de percolação crítico torna-se mais denso.

percolante para  $0 < \sigma < 1$ . Encontramos que  $p_c(\sigma = 1) = 1$  e, desta forma, não existe um *cluster* infinito no limite termodinâmico para concentrações de ligação que decaem como  $1/r^2$  com qualquer diluição finita entre primeiros vizinhos. Nossa análise de tamanho finito na vizinhança de  $p_c(\sigma = 1) = 1$ , indica que, embora a natureza da transição no presente modelo seja do tipo Korsterlitz-Thouless, existem algumas diferenças entre o modelo de percolação geométrica e as transições térmicas de Korsterlitz-Thouless em sistemas unidimensionais com interações tipo  $1/r^2$ . Apesar disto o comportamento obtido é consistente com a descontinuidade da densidade de percolação prevista por Aizenman [85].

Para o regime  $0 < \sigma < 1$ , determinamos a razão média entre as massas dos dois maiores *clusters* no ponto crítico. Próximo do limite  $\sigma = 1$ , o maior *cluster* torna-se muito maior que o segundo maior, resultando em uma convergência suave para o comportamento termodinâmico, devido à proximidade do comportamento de

curto alcance. A dimensão fractal do *cluster* percolante no ponto crítico exibiu dois regimes distintos para  $\sigma$  acima e abaixo de  $1/2$ . Para  $\sigma > 1/2$ , a dimensão fractal coincidiu com o resultado clássico obtido para sistemas com interações que decaem com uma lei de potência, mesmo que esses, em princípio, não se apliquem para a transição de percolação geométrica. Seria interessante reproduzir esses dois regimes através de argumentos de grupo de renormalização adaptados para o modelo de percolação com interações de longo-alcance.

A presente análise de tamanho finito pode ser usada para caracterizar o diagrama de fases do problema de percolação unidimensional com interações de longo-alcance com parâmetros distintos para conexões de curto e longo-alcance. Este estudo pode conduzir a novas informações sobre o comportamento crítico, em particular para o caso de concentrações de ligações que decaem com uma lei de decaimento quadrática.

## 4.2 Percolação quântica

Nesta seção, consideramos um modelo particular de um Hamiltoniano desordenado unidimensional, denominado de percolação quântica, onde a desordem é introduzida através da distribuição binária das ligações entre os sítios. Este modelo é uma generalização do modelo apresentado na seção anterior, sobre a percolação geométrica. O modelo da percolação quântica pode ser usado para o entendimento da propagação de ondas em meios binários não-homogêneos e para analisar as propriedades de transporte eletrônico em semicondutores dopados [109], transição metal-isolante em heteroestruturas bidimensionais de GaAs [110], transições de Hall quânticas [111, 112], entre outros.

Estruturas desordenadas vêm atraindo bastante o interesse da comunidade científica nas últimas décadas e, além do modelo de Anderson [1], o problema da percolação quântica [113, 114] é um dos temas mais discutidos dessa área. O pro-

blema da percolação quântica leva em conta a transmissão quântica através de uma rede desordenada percolante, sendo que a existência de um cluster percolante é uma condição necessária mas não suficiente para que haja a percolação da partícula quântica. Este fato caracteriza a diferença básica entre o problema da percolação clássica e o problema da percolação quântica.

A percolação quântica é formulada freqüentemente em termos de um Hamiltoniano *tight-binding* de um elétron tipo:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_{m,n,n \neq m} V_{m,n} |n\rangle \langle m| \quad (4.9)$$

onde  $V_{n,m}$  representa a amplitude de *hopping* entre o par de sítios  $(m, n)$ ,  $\epsilon_n$  é o potencial no sítio  $n$  e  $|n\rangle$  é o estado de Wannier. Na maior parte dos trabalhos existentes na literatura, a amplitude de *hopping*  $V_{n,m}$  zera sempre que  $m$  e  $n$  não são primeiros vizinhos. Como no caso clássico, pode-se definir percolação por sítios e percolação por ligações. No problema da percolação por sítio, o potencial no sítio  $n$ , dado por  $\epsilon_n$  segue a seguinte distribuição binária:

$$p(\epsilon_n) = p\delta(\epsilon_n - \epsilon_A) + (1 - p)\delta(\epsilon_n - \epsilon_B) \quad (4.10)$$

onde

$$\epsilon_B = -\epsilon_A. \quad (4.11)$$

Neste caso,  $\delta = |\epsilon_A - \epsilon_B|/zV = 2\epsilon_A/zV$  determina o grau de desordem e  $z$  é o número de primeiros vizinhos.  $V_{n,m}$  é geralmente tomado como uma constante  $V$ . Na percolação quântica por ligações, o potencial dos sítios é constante, enquanto que o termo de *hopping*  $V_{n,m}$  é distribuído segundo a função

$$p(V_{n,m}) = p\delta(V_{m,n} - V_A) + (1 - p)\delta(V_{m,n} - V_B) \quad (4.12)$$

onde  $V_B = 0$ .

Os parâmetros  $p$  e  $\epsilon_A$  para percolação por sítios ou  $p$  e  $V$  para percolação por ligações caracterizam as distribuições 4.10 e 4.12. No caso da percolação por sítios,  $p$  é a densidade de átomos do tipo  $A$ , ou seja, é a probabilidade de que um dado sítio seja ocupado por um átomo  $A$ . No caso de percolação por ligações,  $p$  é a densidade de ligações, ou seja, é a probabilidade de ocorrência de uma ligação entre dois sítios. No limite onde  $(\epsilon_A - \epsilon_B) \rightarrow \infty$ , a função de onda é completamente localizada em uma das sub-redes, pois a única forma de uma partícula, inicialmente localizada em  $A$  (ou  $B$ ), ser transmitida por toda a rede é através um caminho de átomos tipo  $A$  ( $B$ ). Para percolação por ligações é necessário que haja um conjunto de ligações que conecte um lado ao outro da rede. Este problema é examinado na teoria da percolação clássica, ou seja, o problema resume-se em encontrar a probabilidade de um tal caminho percolante existir. Sítios que possuem um potencial infinito bem como ligações com *hopping* nulo, indicam um impedimento para o movimento da partícula quântica. Por outro lado, se a diferença  $(\epsilon_A - \epsilon_B)$  é uma quantidade finita, existe uma probabilidade da partícula tunelar de  $A$  para  $B$  ou vice-versa, fazendo com que a condutividade torne-se finita, mesmo que no sistema não seja formado um *cluster* infinito.

Uma das questões básicas acerca do problema da percolação quântica é encontrar a probabilidade crítica  $p_q$  abaixo da qual, todos os auto-estados do Hamiltoniano permanecem localizados. É importante mencionar que o valor desta quantidade é geralmente maior que o valor encontrado para o equivalente clássico. Vários são os trabalhos sobre estimativas do limiar de percolação para o problema da percolação quântica, tanto para o caso da percolação por sítios quanto para o caso da percolação por ligações [115, 116, 117, 118, 119, 120, 121]. Essas estimativas têm sido feitas tanto para o caso da percolação por sítios como para o caso da percolação por ligações. Em ambas as versões, os cálculos numéricos foram feitos para redes

quadradas e para redes cúbicas simples. Para uma rede quadrada, no caso da percolação por sítios,  $p_q$  varia no intervalo de 0.59 até 1.00 enquanto que para uma rede cúbica simples varia no intervalo de 0.38 até 0.48. No caso do análogo clássico, para uma rede quadrada,  $p_c = 0.59$  no caso da percolação por sítios e  $p_c = 0.50$  no caso da percolação por ligações, enquanto que para uma rede cúbica simples, estes valores são  $p_c = 0.31$  na percolação por sítios e  $p_c = 0.25$  para a percolação por ligações. A melhor estimativa na literatura corresponde a  $p_q = 0.44 \pm 0.01$  [119], para o limiar de percolação quântica por sítios para uma rede cúbica simples. No caso da percolação quântica por ligações, o resultado mais aceito para o limiar de percolação numa rede cúbica simples é dado por  $p_q = 0.32 \pm 0.01$  [122] que mostrou também a existência de uma estrutura rica na densidade de estados. Para modelos de percolação quântica em duas dimensões, estudos numéricos detalhados apresentaram evidências convincentes de que nenhuma transição de localização ocorre para qualquer grau de desordem, isto é, a concentração crítica  $p_q = 1$ , tanto para percolação por sítios quanto para percolação por ligações [121]. Este resultado está de acordo com a teoria de escala para a localização de Anderson.

### 4.2.1 Densidade de estados

Uma das quantidades de grande interesse no estudo das propriedades dos auto-estados de sistemas desordenados é a densidade de estados  $\rho(E)$  [1, 123]. A densidade local de estados é definida como [124]

$$\rho_i(E) = \sum_{n=1}^N |\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2 \delta(\mathbf{E} - \mathbf{E}_n) \quad (4.13)$$

que é a soma das amplitudes de todos os auto-estados na posições  $\mathbf{r}_i$ , onde  $N$  é o número de sítios. Esta quantidade contém informação direta sobre as propriedades de localização dos auto-estados. Além da densidade local de estados, pode-se definir também a densidade média de estados como

$$\rho(E) = \frac{1}{MN} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \rho_n(E) \quad (4.14)$$

onde  $M$  é o número de amostras. Essas quantidades apresentam características distintas se forem medidas na fase estendida ou na fase localizada [42]. Para estados estendidos na energia  $E$ , o espaçamento entre os níveis apresenta pequenas flutuações devido à repulsão existente entre eles que se reflete em pequenas flutuações na densidade de estados. Por outro lado, para estados localizados as funções de onda apresentam uma superposição muito pequena. Estes estados não interagem efetivamente e, portanto, não há correlação entre eles. Neste caso, a densidade de estados flutua muito. Desta forma, podemos usar este conceito para determinar a natureza dos estados eletrônicos dos sistemas em estudo.

### 4.2.2 Modelo da percolação quântica com ligações de longo-alcance em $1D$

Vários trabalhos têm sido feitos para melhor compreender as propriedades de transporte em sistemas desordenados, em particular nos sistemas de baixa dimensionalidade que apresentam a transição metal-isolante. Para isso, têm sido feito vários estudos das propriedades dos auto-estados eletrônicos em redes diluídas. As técnicas mais utilizadas são função de Green, teoria de grupo de renormalização, matriz de transferência ou até mesmo diagonalização direta, com a finalidade de calcular as diversas quantidades relevantes do problema, tais como comprimento de localização da função de onda, coeficientes de transmissão e reflexão, condutância e estatística espectral [114, 125, 118, 122, 126, 127, 128]. Resultados numéricos baseados em redes finitas exploram a hipótese de escala de tamanho finito com a finalidade de obter o comportamento termodinâmico. O problema da percolação quântica ainda apresenta vários pontos em aberto, como por exemplo a qual classe de universalidade

esta transição pertence. Os resultados obtidos para os expoentes críticos através de várias técnicas, em geral diferem em relação aos encontrados para o modelo de Anderson com desordem no potencial dos sítios [125, 118, 122, 126]. Entretanto, alguns resultados, tendo como base a análise de estatística do espaçamento entre os níveis, têm indicado que a transição de percolação quântica pode pertencer a mesma classe de universalidade da transição de Anderson [127].

Sistemas unidimensionais que apresentam a transição metal-isolante são importantes, dentro do contexto descrito anteriormente, pois permitem estimativas numéricas precisas dos parâmetros críticos, uma vez que os efeitos de tamanho finito podem ser bem controlados. O modelo de Anderson em uma dimensão, com acoplamentos cujas amplitudes decaem com a distância segundo uma lei de potência do tipo  $1/r^\alpha$ , apresenta uma transição metal-isolante em função do expoente da lei de decaimento. No modelo onde a desordem está presente tanto no potencial quanto nas ligações, todos os estados tornam-se estendidos para  $\alpha < 1$  [29]. No caso de desordem apenas no potencial, o estado no extremo da banda pode ser estendido para  $\alpha < 3/2$  a depender do grau de desordem [36]. A versão quântica do modelo de percolação em uma dimensão com ligações de longo-alcance pode permitir uma comparação direta entre o comportamento crítico da percolação quântica e da transição de Anderson.

Nesta seção, apresentaremos um modelo que é uma generalização do caso clássico estudado na seção anterior incluindo propriedades quânticas e caracterizaremos sua transição de percolação. Nós consideramos um Hamiltoniano *tight-binding*, em uma dimensão, com amplitudes de *hopping* de longo-alcance dado por

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + V \sum_{n \neq m} h(r = |m - n|) |n\rangle \langle m| \quad (4.15)$$

onde a soma é feita em toda a extensão da rede e a amplitude de *hopping* será tomada constante e unitária ( $V = 1$ ), sem perda de generalidade. A presença ou

não da ligação entre o par de sítios  $(m, n)$  é controlada pela variável binária  $h(r)$  que pode assumir os valores  $h(r) = 0$  ou  $h(r) = 1$  de acordo com a seguinte distribuição

$$\mathcal{P}[h(r)] = p(r)\delta[h(r) - 1] + [1 - p(r)]\delta[h(r)] \quad (4.16)$$

com a probabilidade  $p(r)$  decaindo com uma lei de potência segundo

$$p(r_{m,n}) = \frac{p}{|m - n|^{\sigma+d}} \quad (4.17)$$

onde  $d = 1$  é a dimensão da rede, e  $r_{m,n} = |m - n|$  é a distância entre os sítios  $m$  e  $n$ .

O modelo clássico equivalente, apresenta um valor crítico  $p_c$ , acima do qual sempre existe um *cluster* percolante para  $\sigma \leq 1$  como demostramos na seção anterior [130]. Para  $\sigma \leq 0$ , sempre está presente um *cluster* infinito para qualquer valor finito de  $p$  (densidade de ligações entre primeiros vizinhos).

### 4.2.3 Percolação quântica de longo-alcance e o comportamento de escala

Assim como no caso da percolação clássica, mostrado na seção anterior, o presente problema apresenta um comportamento de escala nas proximidades do ponto crítico, ou limiar de percolação. O Hamiltoniano dado pela equação 4.15 foi diagonalizado numericamente para cadeias de tamanho finito  $N$ , com o objetivo de obter todos os auto-estados de um elétron dados por  $|\psi^k\rangle = \sum_n \psi_n^k |n\rangle$ . Em nossos cálculos numéricos, nós realizamos a diagonalização do Hamiltoniano correspondente apenas ao maior cluster uma vez que a transição de percolação quântica ocorre nos estados pertencentes ao *cluster* percolante.

Para caracterizar os auto-estados de um elétron, calculamos a função participação dada por

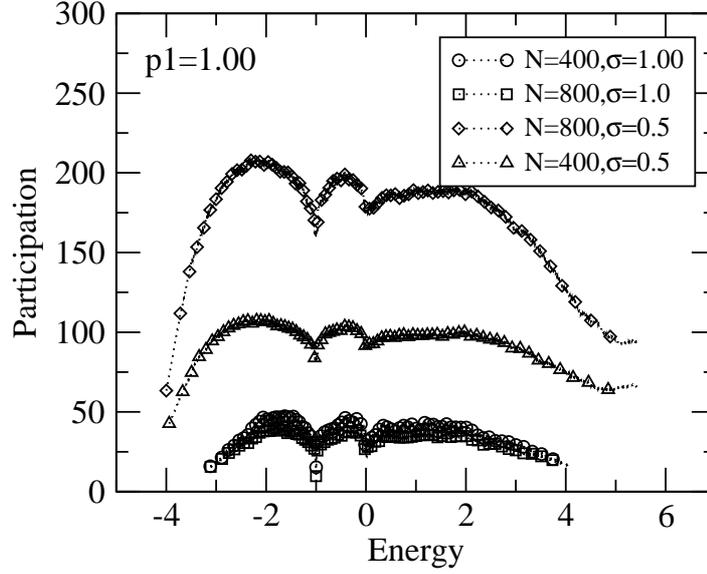


Figura 4.7: *Função participação como função da energia, para dois tamanhos distintos de cadeia,  $N = 400$  e  $N = 800$  em  $p = 1$  para 400 configurações de desordem. Para  $\sigma = 0.5$ , a função participação escala linearmente com o comprimento da cadeia, indicando assim que os estados são estendidos. Para  $\sigma = 1.0$ , a função participação não escala com o comprimento da cadeia, indicando a presença de estados localizados*

$$P^k = \frac{1}{\sum_n [\psi_n^k]^4}. \quad (4.18)$$

De acordo com a hipótese de escala de tamanho finito, esta função escala com o tamanho do sistema no ponto crítico de acordo com

$$P \propto N^{D_f} \quad (4.19)$$

com  $D_f < 1$  devido ao comportamento tipo lei de potência da cauda da função de onda e seu caráter multifractal no ponto crítico [132, 133, 134, 135]. Ressaltamos mais uma vez que para estados localizados a participação é independente do tamanho do sistema e para estados estendidos a participação escala linearmente com o tamanho do sistema.

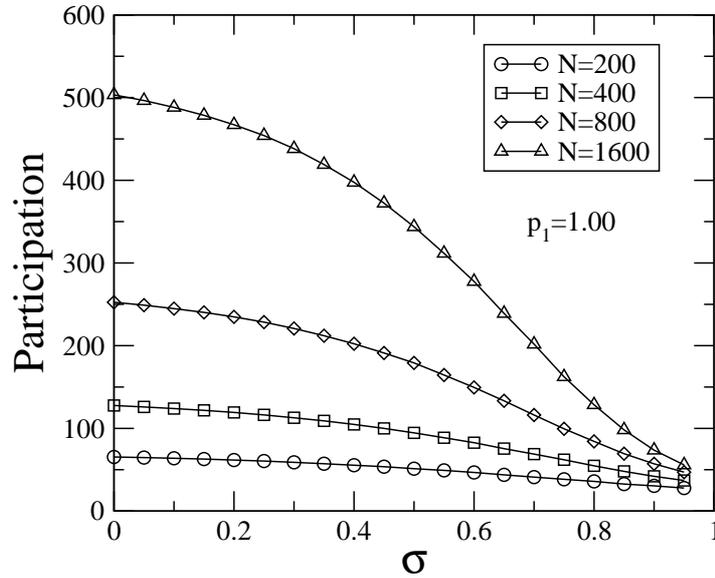


Figura 4.8: Função participação média em  $p = 1$  em função do expoente da lei de decaimento  $\sigma$  para 400 configurações de desordem e diferentes tamanhos da cadeia. Note a mudança do regime estendido para  $\sigma$  pequeno onde a participação é proporcional ao tamanho da cadeia para o regime localizado onde  $P$  é independente de  $N$

Na figura 4.7, apresentamos o comportamento da função participação em função da energia dos auto-estados. Estes dados foram obtidos através da diagonalização exata do Hamiltoniano expresso pela equação 4.15 em cadeias de tamanhos  $N = 400$  e  $N = 800$  para 400 configurações de desordem. Nesta figura, escolhemos  $p = 1$  de tal forma que todos os sítios estão conectados através de ligações de primeiros vizinhos. Neste caso, existe percolação geométrica. Entretanto, a desordem presente nas ligações de vizinhos mais distantes pode causar a localização dos estados eletrônicos. A figura ilustra dois casos representativos. Para  $\sigma = 1$  a função participação é independente do tamanho da cadeia para toda a banda de energia, indicando que os estados eletrônicos são todos localizados. Para  $\sigma = 1/2$ , a função participação escala linearmente com o tamanho da cadeia, que é o comportamento típico de estados estendidos. Desta forma, existe um valor crítico de  $\sigma$  abaixo do qual existe percolação quântica.

Para localizar o ponto crítico, nós medimos a participação média de todos os auto-estados definida por  $P = 1/M \sum_k P_k$ , onde  $M$  é o número de configurações de ligações, como mostrado na figura 4.8. Nesta figura, a função participação média é plotada como função do expoente da lei de decaimento  $\sigma$  para 400 configurações de desordem e tamanho da cadeia alcançando de  $N = 200$  até  $N = 1600$ . Note a mudança do regime estendido, onde a função participação escala com o tamanho da cadeia para  $\sigma$  pequeno, para o regime localizado onde a função participação independe do tamanho da cadeia para valores de  $\sigma$  próximo da unidade. Este comportamento é semelhante ao observado no caso da percolação clássica para a massa do *cluster* percolante. Portanto, é possível utilizar a mesma técnica de grupo de renormalização fenomenológico implementada na seção anterior para localizar o ponto crítico da transição de percolação quântica.

Nas proximidades do ponto crítico, a função participação média deve escalar como:

$$P = L^{D_f} g[(\sigma - \sigma_c)N^{1/\nu}]. \quad (4.20)$$

A estimativa dos parâmetros críticos pode ser feita com base no conjunto de funções auxiliares:

$$f(N, N', \sigma) = \ln[P(N, \sigma)/P(N', \sigma)] / \ln[N/N'] \quad (4.21)$$

De acordo com a hipótese de escala por tamanho finito, estas funções devem ter um ponto comum para quaisquer pares de tamanhos  $(N, N')$ , o que localiza precisamente o ponto crítico, a menos de pequenas correções de escala. O valor dessas funções no ponto crítico corresponde ao expoente crítico  $D_f$ .

#### 4.2.4 Diagrama de fases, dimensão fractal e densidade de estados

Em nossos cálculos numéricos, consideramos cadeias de tamanhos distintos, desde  $N = 200$  até  $N = 1600$ . Para cada valor da densidade de ligações entre primeiros vizinhos  $p$ , medimos o valor médio da participação como função do expoente de decaimento  $\sigma$ , para os diferentes tamanhos de cadeia. Usando as funções auxiliares de renormalização definidas em 4.21, encontramos o ponto crítico  $p_c(\sigma)$  através do cruzamento das curvas para pares de tamanhos distintos da cadeia. Um gráfico representativo deste cruzamento é exibido na figura 4.9 para  $p = 1$ , através do qual nós estimamos  $\sigma_c(p = 1) = 0.78$ . Uma vez localizado o ponto crítico, nós verificamos como a participação média escala com o tamanho da cadeia no ponto crítico. O Expoente da lei de potência fornece a dimensão fractal dos estados críticos com maior precisão que a estimativa fornecida pela intersecção das funções auxiliares  $f(N, N', \sigma)$ . Nossa melhor estimativa para a transição que ocorre em  $p = 1$  forneceu  $D_f(p = 1) = 0.66$ .

O método de renormalização numérica empregado na obtenção da figura 4.9 foi usado para obter o diagrama de fases da percolação quântica, ou seja  $p_c$  como função do expoente de decaimento  $\sigma$ . Como esperado,  $p_c^Q \geq p_c^C$  para todos os valores no intervalo de  $0 < \sigma < 1$ , como mostrado na figura 4.10, indicando que mesmo havendo um *cluster* percolante, não há necessariamente percolação quântica. Para pequenos valores de  $\sigma$ , a diferença entre  $p_c^Q$  e  $p_c^C$  é pequena, mas cresce a medida que  $\sigma$  cresce. É interessante notar que para  $0.78 < \sigma < 1$  não existe percolação quântica mesmo em  $p = 1$ , apesar de toda a cadeia ser conectada.

A técnica de renormalização numérica fornece também a dimensão fractal  $D_f$  dos auto-estados eletrônicos no ponto crítico. Na figura 4.11, mostramos a dimensão fractal como função da densidade de ligações entre primeiros vizinhos  $p$ , no intervalo  $0 < p < 1$ . Note que para  $p \rightarrow 1$ , a dimensão fractal  $D_f < 1$ , ou seja, os estados

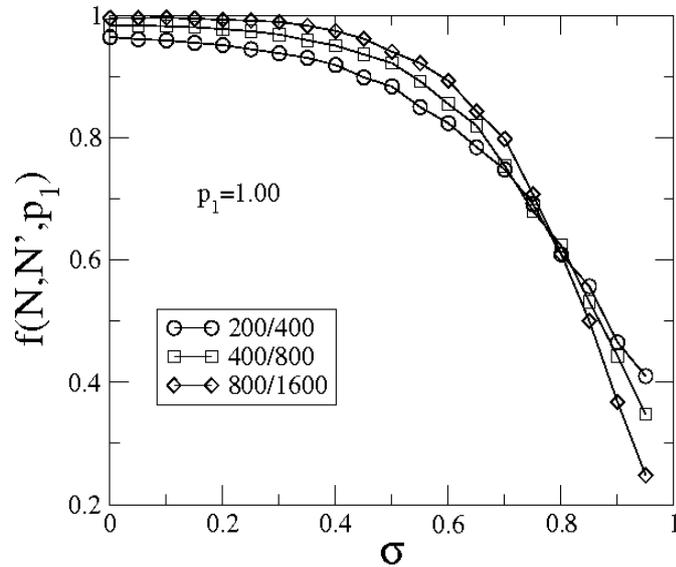


Figura 4.9: Funções  $f(N, N', \sigma)$  como função do expoente de decaimento ( $\sigma$ ), para diferentes pares de tamanho da cadeia em  $p = 1$ . Os cálculos foram feitos sobre 400 configuração de desordem. O ponto de intersecção demarca o ponto crítico  $\sigma_c(p)$ .

críticos estão distribuídos na cadeia de forma fractal. No limite oposto,  $p \rightarrow 0$ , a dimensão fractal dos auto estados críticos vai para um valor finito, semelhante à dimensão fractal do cluster percolante, indicando que os estados críticos ocupam uniformemente todo o cluster.

Para complementar nossa análise, nós obtivemos a densidade de estados através da diagonalização exata para dois conjuntos de parâmetros representativos da fase localizada e da fase estendida como mostra a figura 4.12. Note que na fase estendida ( $p = 1, \sigma = 1/2$ ), a densidade de estados é relativamente suave como esperado por causa da repulsão entre os níveis. Esta densidade de estados é tipicamente mais larga do que o caso localizado por causa do maior alcance dos acoplamentos. Para a fase localizada ( $p = 1, \sigma = 1$ ), observamos maiores flutuações na densidade de estados. É interessante notar que a densidade de estados apresenta alguns picos que são mais visíveis na fase localizada, mas que também estão presentes na fase estendida. Estudos anteriores para percolação quântica em redes

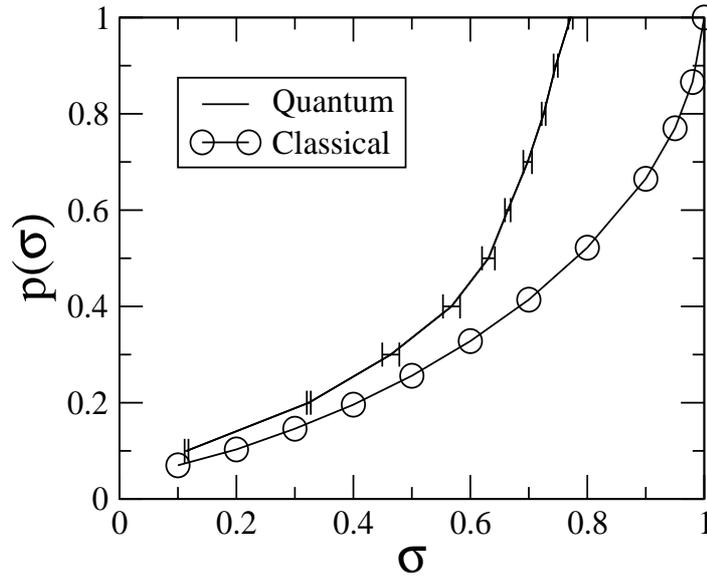


Figura 4.10: Diagrama de fases para percolação com ligações de longo-alcance para ambos os casos clássico e quântico. Em todo o intervalo de valores de  $\sigma$  exibido no gráfico, foi confirmado que  $p_c^Q \geq p_c^C$ . No caso quântico, o resultado foi obtido através de renormalização numérica da função participação. No caso clássico, os pontos críticos foram obtidos tanto da renormalização numérica da massa do maior cluster quanto das propriedades de invariância de escala da razão média das massas do maior e segundo maior cluster. Note que existe uma região em que há percolação geométrica clássica mas não há percolação quântica.

cúbicas simples, com diluição tanto de ligações quanto de sítios, também observaram a presença de picos na densidade de estados que foram relacionados a estados localizados em regiões terminais do cluster percolante [126, 131]. Em princípio, existe um conjunto discreto infinito de energias ressonantes com funções de onda localizadas em regiões próximas a terminais do cluster infinito. Entre elas, há um espectro contínuo de estados estendidos, cuja densidade vai a zero nas energias ressonantes. No nosso modelo de percolação quântica em uma dimensão com acoplamentos de longo-alcance, nós podemos identificar claramente duas energias ressonantes em  $E = -1$  e  $E = 0$ .

Os estados com energia  $E = -1$  correspondem a estados localizados em pares de sítios  $(a, b)$  que estão conectados com mesmo conjunto de sítios da rede, além de

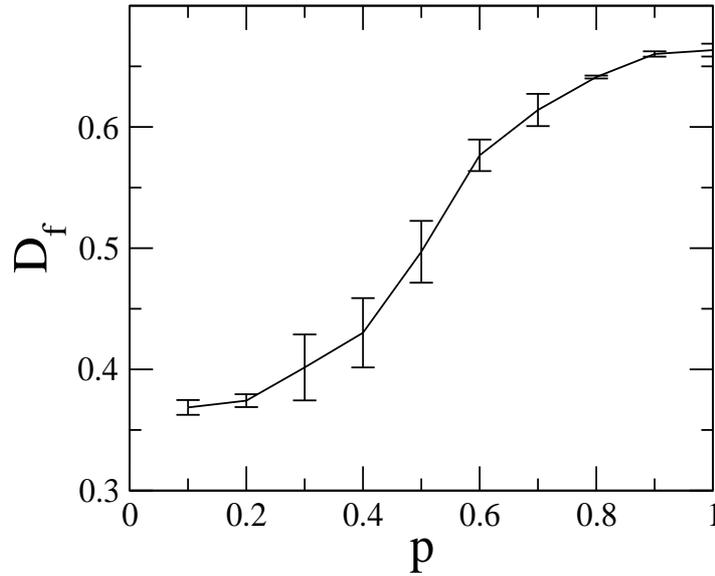


Figura 4.11: *Dimensão fractal das funções de onda críticas como função da densidade de ligações de primeiros vizinhos  $p$ . No limite quando  $p \rightarrow 1$ , a dimensão fractal  $D_f < 1$  indicando que os estados críticos estão distribuídos na cadeia de forma fractal. No outro extremo, onde  $p \rightarrow 0$ , a dimensão fractal vai para um valor finito equivalente à dimensão fractal do cluster infinito.*

estarem diretamente conectados entre si. Neste caso, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 H|a\rangle &= |b\rangle + \sum_j |j\rangle \\
 H|b\rangle &= |a\rangle + \sum_j |j\rangle
 \end{aligned}
 \tag{4.22}$$

onde a soma é feita sobre todos os sítios que estão conectados ao par  $(a, b)$ . Subtraindo as equações acima é fácil observar que a combinação anti-simétrica  $|\psi\rangle = 1/\sqrt{2}(|a\rangle - |b\rangle)$  é auto-estado do Hamiltoniano com auto-valor  $E = -1$ . A intensidade deste pico na densidade de estados está relacionada a probabilidade deste tipo de estrutura ocorrer ao longo da cadeia.

A ressonância em  $E = 0$ , corresponde a estados localizados em pares de sítios

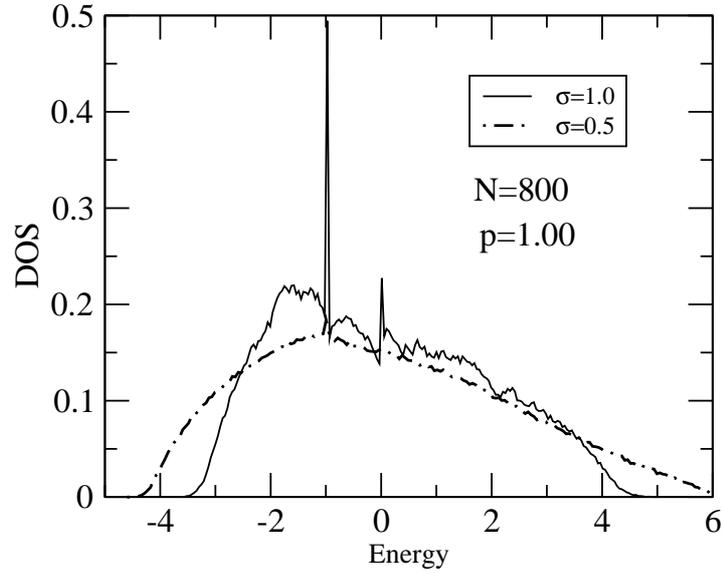


Figura 4.12: *Densidade de estados (DOS) como função da energia para uma cadeia de tamanho  $L = 800$  para  $p = 1.00$ . Para  $\sigma = 1$  a densidade de estados flutua muito, indicando que os estados são localizados, mesmo na presença de um cluster infinito. Para  $\sigma = 0.5$  a densidade de estados é mais suave indicando a presença de estados estendidos. Note a presença de energias ressonantes em  $E = -1$  e  $E = 0$ .*

( $a, b$ ) que, apesar de estarem conectados com o mesmo conjuntos de sítios da rede, não estão diretamente conectados entre si. Desta forma, temos

$$\begin{aligned} H|a\rangle &= \sum_j |j\rangle, \\ H|b\rangle &= \sum_j |j\rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Neste caso a combinação anti-simétrica  $|\psi\rangle = 1/\sqrt{2}(|a\rangle - |b\rangle)$  é um auto-estado com auto-valor  $E = 0$ . O pico na densidade de estados correspondente a esta ressonância é menor que o pico em  $E = -1$ , uma vez que esta estrutura surge ao longo da cadeia em menor número.

Em resumo, nós estudamos um modelo *tight-binding* em uma dimensão com

*hopping* de longo-alcance, onde a probabilidade de ocorrência de ligação entre sítios a uma distância  $r$  é dada por  $p(r) = p/r^{1+\sigma}$ . Para o regime  $0 < \sigma < 1$ , o diagrama de fases foi obtido, como mostra a figura 4.10. A concentração crítica neste modelo de percolação quântica é maior que a concentração crítica de percolação geométrica. Desta forma, este modelo apresenta uma fase para a qual, apesar da existência de um *cluster* percolante, todos os estados eletrônicos permanecem exponencialmente localizados. Estados estendidos surgem neste modelo para  $\sigma < 0.78$ . É importante destacar que os modelos de Anderson encontrados na literatura, com acomplamentos de longo-alcance em uma dimensão requerem um decaimento mais lento das amplitudes de *hopping* para que estados estendidos possam ocorrer ( $\sigma < 1/2$  para desordem apenas no potencial ou  $\sigma < 0$  para desordem tanto no potencial quanto nas amplitudes de *hopping*). O presente modelo portanto é um exemplo claro de que a transição de percolação quântica não apresenta sempre uma transição de Anderson correspondente. Obtivemos ainda a dimensão fractal dos auto-estados eletrônicos no ponto crítico. Esta dimensão fractal é da mesma ordem da dimensão fractal no *cluster* percolante para  $p \ll 1$ . Entretanto, em  $p = 1$  a dimensão fractal do auto-estado crítico é menor que a dimensão da cadeia indicando que esse auto-estado crítico não ocupa o cluster percolante de forma densa neste regime. Por fim, analisamos algumas características da densidade de estados. A natureza dos estados estendidos ou localizados se reflete nas flutuações estatísticas da densidade de estados. Picos ressonantes foram encontrados e relacionados a estados localizados em algumas configurações locais com simetrias especiais. Este modelo, portanto, apresenta várias características interessantes associadas ao problema da localização de Anderson e da percolação quântica que podem ser futuramente explorados em mais detalhes com o objetivo de estabelecer de forma mais clara a relação entre as classes de universalidade destas transições.

# Capítulo 5

## Conclusões

Neste capítulo faremos um resumo dos principais resultados obtidos neste trabalho. No capítulo 1 apresentamos, de maneira geral as principais propriedades de transporte eletrônico em sólidos amorfos. Apresentamos alguns modelos, referentes a sólidos cristalinos e modelos mais gerais que buscam explicar a natureza dos fenômenos associados a problemas que envolvem a propagação de ondas em meios desordenados, como o modelo de Anderson e teoria de escala para a transição de Anderson.

No capítulo 2, apresentamos um modelo de Anderson unidimensional simples onde a cadeia de Anderson é diluída de forma que entre dois sítios de Anderson, existe um sítio de uma sub-rede pura com potencial  $\epsilon_0$  em cada sítio. Devido à presença de estados estendidos, este modelo não apresenta a localização usual do pacote de onda comum dos sistemas eletrônicos desordenados unidimensionais. Nós obtivemos uma dependência não-trivial da evolução temporal do pacote de onda com a posição inicial do elétron. Quando o elétron foi posto inicialmente em um sítio da cadeia pura, o pacote de onda eletrônico apresentou uma expansão mais rápida do que a apresentada quando o elétron foi posto inicialmente num sítio de Anderson ou de potencial aleatório. Os estados estendidos neste modelo estão lo-

calizados nos sítios da cadeia pura e, sendo assim, um pacote de onda totalmente localizado em um sítio da cadeia de Anderson tem uma pequena contribuição vinda da componente espectral com grandes comprimentos de localização. Desta forma, a função de onda alarga-se de forma mais lenta que no caso onde o elétron é posto inicialmente localizado no sítio da cadeia pura. Além disso, nós mostramos neste modelo que a cauda da função de onda desenvolve uma distribuição espacial tipo lei de potência (ver Fig 2.4) e os característicos expoentes de escala da distribuição espacial da função de onda são diferentes para distintas condições iniciais (ver Fig 2.4), mostrando que o comportamento dinâmico assintótico é extremamente sensível às condições iniciais do modelo.

No capítulo 3, estudamos a propagação de um pulso em uma cadeia harmônica desordenada e diluída. Neste modelo, sítios de massa constante  $m_0$  intercalam sítios de massas aleatórias com distribuição uniforme. Este modelo apresenta um modo harmônico estendido na frequência  $\omega_c$ , com deslocamento nulo nas massas aleatórias. O expoente de Lyapunov zera linearmente quando a frequência se aproxima da frequência de ressonância. Além disso, a densidade de estados apresentou uma singularidade divergente na frequência de ressonância. Nós mostramos que a presença deste modo ressonante pode modificar a evolução temporal de uma excitação inicialmente localizada. Através do cálculo do segundo momento da distribuição espacial da energia  $M_2(t)$ , nós encontramos que uma excitação inicial por impulso alarga-se de forma super-difusiva  $M_2(t) \sim t^{1.5}$ , mesmo na presença da diluição. Por outro lado, a expansão de uma excitação inicial por deslocamento é fortemente afetada pela diluição, mudando de um comportamento sub-difusivo [ $M_2(t) \sim t^{1/2}$ ] na ausência de diluição para uma difusão mais rápida [ $M_2(t) \sim t^1$ ] na cadeia diluída.

Os problemas estudados nos capítulos 2 e 3 são exemplos de situações físicas nas quais correlações na distribuição da desordem podem levar a uma violação na teoria de escala para localização de Anderson. Nestes modelos, as correlações intro-

duzidas pelas correlações na desordem promovem o surgimento de estados estendidos ressonantes mesmo em sistemas de baixa dimensionalidade. Mostramos que a presença de estados ressonantes pode modificar substancialmente as propriedades de transporte.

Um segundo mecanismo que leva a violação da localização de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade envolve transporte através de amplitudes de *hopping* de longo-alcance. No capítulo 4, estudamos o problema da percolação com ligações de longo alcance, tanto para a versão clássica quanto para a versão quântica. No modelo estudado, a probabilidade de existência de uma ligação entre sítios separados por uma distância  $r$  é dada por  $p(r) = p/r^{1+\sigma}$ . Obtivemos o diagrama de fases e o comportamento crítico de ambas as versões. No caso clássico, obtivemos uma dependência simples da dimensão fractal com o expoente de decaimento  $\sigma$ . Em particular, para valores de  $\sigma > 1/2$ , o comportamento obtido foi similar ao comportamento obtido classicamente através de teorias de grupo de renormalização para sistemas cujas interações decaem com uma lei de potência. A concentração crítica de percolação quântica foi obtida através de métodos de diagonalização exata e argumentos de escala como sendo maior que a concentração crítica de percolação geométrica. Assim, o modelo de percolação quântica apresentou uma fase em que, mesmo na existência de um *cluster* percolante, todos os estados eletrônicos permanecem exponencialmente localizados. Estados estendidos surgem neste modelo para  $\sigma < 0.78$ . A dimensão fractal encontrada dos auto-estados eletrônicos no ponto crítico foi da mesma ordem da dimensão fractal no *cluster* percolante para  $p \ll 1$ . Em  $p = 1$ , a dimensão fractal do auto-estado crítico é menor que a dimensão da cadeia, indicando que esse auto-estado crítico não ocupa o cluster percolante de forma densa neste regime. A natureza dos estados estendidos ou localizados foi refletida também nas flutuações estatísticas da densidade de estados. Picos ressonantes foram encontrados e relacionados a estados localizados em algumas configurações locais

com simetrias especiais. Este modelo, portanto, apresentou várias características interessantes associadas ao problema da localização de Anderson e da percolação quântica que podem ser futuramente explorados em mais detalhes com o objetivo de estabelecer de forma mais clara a relação entre as classes de universalidade destas transições.

Os resultados obtidos nesta tese abrem a perspectiva para uma série de estudos relevantes com relação a teoria de escala em sistemas de baixa dimensionalidade. Com relação ao modelo com desordem diluída, seria interessante estudar a diluição da desordem com segmentos maiores e com simetrias que produzam estados ressonantes degenerados, o que pode induzir um alargamento mais rápido do pacote de onda. Ainda neste contexto, foi demonstrado recentemente que a diluição da desordem em duas dimensões leva ao surgimento de uma banda de estados estendidos [53]. Seria importante investigar com detalhes a dinâmica de pacotes de onda inicialmente localizados nos moldes desenvolvidos no presente trabalho, para investigar a possível influência desta banda de estados estendidos nas propriedades de transporte. Com relação à percolação quântica em cadeias com ligações de longo alcance, a caracterização da classe de universalidade deste problema pode ser complementada por estimativas numéricas do expoente do comprimento de correlação. Neste sentido, será necessário o desenvolvimento de algoritmos computacionais mais eficientes que os utilizados neste trabalho, uma vez que estimativas precisas deste expoente requerem dados de cadeias mais longas e uma melhor estatística, devido a fortes correções de escala. Uma questão de interesse neste problema diz respeito a evolução temporal de pacotes de onda inicialmente localizados. No modelo de Anderson correspondente, o pacote de onda apresenta um espalhamento do tipo difusivo e adquire um perfil não uniforme após refletir nos extremos da cadeia [129]. Para o problema da percolação quântica um comportamento semelhante deve ocorrer, mas a presença de estados ressonantes localizados pode trazer novos fenômenos

ainda não explorados. Esperamos que estas questões venham a ser investigadas em futuras contribuições ao tema.

# Referências Bibliográficas

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [3] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York, 1983).
- [4] I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul and L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).
- [5] B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [6] N.F. Mott and E.A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, (Clarendon Press, Oxford, 1971). Veja também N.F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor e Francis, London, 1974).
- [7] F.J. Wegner, Z. Phys. B **36**, 209 (1980).
- [8] G. Theodorou and M. Cohen, Phys. Rev. B. **13**, 4597 (1976).
- [9] L. Fleishman and D.C. Licciardello, J. Phys. C **10** L125 (1977).
- [10] C.M. Soukoulis and E.N. Economou, Phys. Rev. B **24** 5698 (1981).
- [11] J.C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter. **1**, 8471 (1989).
- [12] D.H. Dunlap, K.Kundu and P. Phillips, Phys. Rev. B **40**, 10999 (1989).

- [13] M. Griniasty and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988).
- [14] S. Das Sarma, Song He and X.C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988).
- [15] D.H. Dunlap, H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [16] M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, L367 (1997).
- [17] F. Domínguez-Adame, I. Gomes, A. Avakyan, D. Sedrakyan and A. Sedrakyan, Physica Status Solidi B **221**, 633 (2000).
- [18] E. Lazo and M.E. Onell, Physica B **299**, 173 (2001).
- [19] F.A.B.F. de Moura, M.N.B. Santos, U.L. Fulco, M.L. Lyra, E. Lazo and M.E. Onell, Eur Phys. J. B **36**, 81(2003).
- [20] F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); *ibid.* **84**, 199 (2000).
- [21] F.M. Izrailev and A.A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999).
- [22] H. Shima, T. Nomura and T. Nakayama, Phys. Rev. B **70**, 075116 (2005).
- [23] G. Schubert, A. Weiße and H. Fehske, Physica B **359**, 801 (2005).
- [24] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo and M.L. Lyra, Europhys. Lett. **66**, 585 (2004).
- [25] B. Santos, L.P. Viana, M.L. Lyra and F.A.B.F. de Moura, Solid. State Commun. **138**, 585 (2006).
- [26] E.L. Albuquerque, M.L. Lyra and F.A.B.F. de Moura, Physica A **370**, 625 (2006).
- [27] E.L. Albuquerque, M.S. Vasconcelos, M.L. Lyra and F.A.B.F. de Moura, Phys. Rev. E **71**, 021910 (2005).

- [28] F.Domínguez.-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **91**, 197402 (2003).
- [29] A.D. Mirlin, Y.V. Fyodorov, F.-M Dittes, J. Quezada and T. H. Seligman, Phys. Rev. E. **54**, 322 (1996).
- [30] A.D. Mirlin and F. Evers, Phys. Rev. B **62**, 7920 (2000)
- [31] R.P.A. Lima, H.R. da Cruz, J.C. Cressoni and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **69**, 165117 (2004).
- [32] F. Evers and A.D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **84**, 3690 (2000) .
- [33] B. Shapiro, Phys. Rev. B **34**, 4394 (1986); Philos. Mag. B **56**, 1031 (1987) .
- [34] A. Cohen, Y. Roth and B. Shapiro, Phys. Rev. B **38**, 12125 (1988) .
- [35] A. Rodríguez, V.A. Malyshev, G. Sierra, M.A. Martín-Delgado, J. Rodríguez-Laguna and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. Lett. **90**, 027404 (2003) .
- [36] F.A.B.F. de Moura, A.V. Malyshev, M.L. Lyra, V.A. Malyshev and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev B **71**, 174203 (2005).
- [37] T.A.L. Ziman, Phys. Rev. Lett. **49**, 337 (1982) .
- [38] G. Theodorou, J. Phys. C **15**, L1315 (1982) .
- [39] R. Riklund and M. Severin, J. Phys. C **21**, L965 (1988) .
- [40] S.N. Evangelou and D.E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992) .
- [41] S.N. Evangelou, A.Z. Wang, and S.J. Xiong, J. Phys.: Condens.Matter **6**, 4937 (1994) .
- [42] A.D. Mirlin and Y.V. Fyodorov, J. Phys. I **4**, 655 (1994) .

- [43] E.M. Nascimento, F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **72**, 224420 (2005).
- [44] P. Dean, Proc. Phys. Soc. **84**, 727 (1964).
- [45] P. Dean, Rev. Mod. Phys. **44**, 127 (1972); Proc. Roy. Soc. **254** 123, (1960).
- [46] H. Matsuda and K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **45**, 56 (1970); K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **53**, 77 (1973).
- [47] P.K. Datta and K. Kundu, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4465 (1994).
- [48] F. Dominguez-Adame, E. Macià, and A. Sánchez, Phys. Rev. B **48**, 6054 (1993).
- [49] P.K. Datta and K. Kundu, Phys. Rev. B **51**, 6287 (1995).
- [50] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **68**, 012202 (2003).
- [51] M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 4773 (1994).
- [52] H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991).
- [53] M. Hilke, Phys. Rev. Lett. **91**, 226403 (2003).
- [54] S. Bogdanovich and D. Popovic, Phys. Rev. Lett. **88**, 236401 (2002).
- [55] R. Leturcq, D. L'Hôte, R. Tourbot, C.J. Mellor and M. Henini, Phys. Rev. Lett. **90**, 076402 (2003).
- [56] R. Ketzmerick, K. Kruse, S. Kraut and T. Geisel, Phys. Rev. Lett. **79**, 1959 (1997).
- [57] D.E. Katsanos, S.N. Evangelou and S.J. Xiong, Phys. Rev. B **51**, 895 (1995).

- 
- [58] Q. Niu and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **57**, 2057 (1986).
- [59] J.P. Lu, T. Odagaki and J.L. Birman, Phys. Rev. B **33**, 4809 (1986).
- [60] E.L. Albuquerque and M.G. Cottam, *Polaritons in Periodic Quasiperiodic Structures*, (Elsevier, Amsterdam, 2004).
- [61] Veja, por exemplo, D.M. Cláudio e J. M. Martins, *Cálculo Numérico Computacional*, (Editora Atlas, São Paulo, 1994).
- [62] R. Orbach, Philos Mag. B **65**, 289 (1992).
- [63] B. Li, H. Zhao and Bhu, Phys. Rev. Lett. **86**, 63 (2001).
- [64] P.L. Garrido, P.I. Hurtado and Nadrowski, Phys. Rev. Lett. **86**, 5486 (2001).
- [65] A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **88**, 249401 (2002).
- [66] F.A.B.F. de Moura, L.P. Viana and A.C. Frery, Phys. Rev. B **73**, 212302 (2006).
- [67] B. Li, H. Zhao and B. Hu, Phys. Rev. Lett. **86**, 63 (2001); A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **86**, 5882 (2001).
- [68] A.V. Savin, G.P. Tsironis and A.V. Zolotaryuk, Phys. Rev. Lett. **88**, 154301 (2002).
- [69] O. Narayan and S. Ramaswamy, Phys. Rev. Lett. **89**, 200601 (2002).
- [70] A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **88**, 249401 (2002); P.L. Garrido and P.I. Hurtado, Phys. Rev. Lett. **88**, 249402 (2002); H.B.Li, Y.H. Wang and H. Zhao, Phys. Rev. Lett. **89**, 079401 (2002); P.L. Garrido and P.I. Hurtado, Phys. Rev. Lett. **89**, 079402 (2002).

- [71] M. Wagner, G. Zart, J. Vazquez-Marquez, G. Viliani, W. Frizzera, O. Pilla and M. Montagna, *Philos. Mag. B* **65**, 273 (1992).
- [72] P.W. Kasterleyn and C.M. Fourtuin, *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **26**, 11 (1969).
- [73] L.S. Schulman, *J. Phys. A* **16**, L639 (1983) .
- [74] C.M. Newman and L.S. Schulman, *Commun. Math. Phys.* **104**, 547 (1986) .
- [75] M. Aizenman and C.M. Newman, *Commun. Math. Phys.* **107**, 611 (1986) .
- [76] M.E. Fisher, S.-K. Ma and B. G. Nickel, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 917 (1972) .
- [77] P.J. Ford, *Contemp. Phys.* **23**, 141 (1982).
- [78] K.S. Pitzer, M.C.P. de Lima and D.R. Schreiber, *J. Phys. Chem.* **89**, 1854 (1985) .
- [79] P.W. Anderson and G. Yuval, *Phys. Rev. B* **1**, 1522 (1970) .
- [80] M.L. Lyra, M. Kardar and N.F. Svaiter, *Phys. Rev. E* **47**, 3456 (1993) .
- [81] D.J. Amit, *Modeling Brain Functions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1989).
- [82] E.P. Borges and C. Tsallis, *Physica A* **305**, 148 (2002) .
- [83] D.J. Watts and S.H. Strogatz, *Nature* **393**, 440 (1998) .
- [84] J.L. Cardy, *J. Phys. A* **14**, 1407 (1981) .
- [85] M. Aizenman, J.T. Chayes, L. Chayes and C.M. Newman, *J Stat. Phys.* **50**, 1 (1988) .
- [86] J.Z. Imbrie and C.M. Newman, *Commun. Math. Phys.* **118**, 303 (1988) .
- [87] E. Luijten and H. Meßingfeld, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5305 (2001) .

- [88] J.M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **37**, 1577 (1976) .
- [89] S.A. Cannas and A.C.N. de Magalhes, J. Phys. A **30**, 3345 (1997) .
- [90] Z. Glumac and K. Uzelac, Phys. Rev. E **58**, 4372 (1998) .
- [91] S. Reynal and H.T. Diep, Phys. Rev. E **69**, 026109 (2004) .
- [92] Z.Q. Zhang, F.C. Pu and B.Z. Li, J. Phys. A **16**, L85 (1983) .
- [93] C.F. Moukarzel and M.A. de Menezes, Phys. Rev. E **65**, 056709 (2002) .
- [94] M. Biskup, Ann. Prob. **32**, 2938 (2004) .
- [95] N. Berger, Commun. Math. Phys. **226**, 531 (2002).
- [96] H.H.A. Rego, L.S. Lucena, L.R. da Silva and C. Tsallis, Physica A **266**, 42 (1999) .
- [97] N. Jan, Physica A **266**, 72 (1999) .
- [98] D. Stauffer, Int. J. Mod. Phys. C **11**, 519 (2000) .
- [99] C.R. da Silva, M.L. Lyra and G.M. Viswanathan, Int. J. Mod. Phys. C **11**, 1411 (2000).
- [100] C.R. da Silva, M.L. Lyra and G.M. Viswanathan, Phys. Rev. E **66**, 056107 (2002) .
- [101] M. Sahimi, J. Phys. A **18**, 3597 (1985) .
- [102] N. Jan, D. Stauffer and A. Aharony, J. Stat. Phys. **92**, 325 (1998) .
- [103] M. Aizenman, Nucl. Phys. B **485**, 551 (1997).
- [104] M.S. Watanabe, Phys. Rev. E **53**, 4187 (1996) .

- [105] P. Sen, Int. J. Mod. Phys. C **8**, 229 (1997).
- [106] D. Stauffer and C. Jayaprakash, Phys. Lett. A **64**, 433 (1978).
- [107] A. Margolina and H. J. Herrmann, Phys. Lett. A **104**, 295 (1984).
- [108] W.K. Theumann and M.A. Gusmão, Phys. Rev. B **31**, 379 (1985) .
- [109] M. Inui, S.A. Trugman and E. Abrahams, Phys. Lett B **49**, 3190 (1994).
- [110] S. Das Sarma, P.M. Lilly, E.H. Hwang, L.N. Pfeiffer, K.W. West and J. L.Remo, Phys. Rev. Lett. **94**, 136401 (2005).
- [111] Y. Dubi, Y. Meir and Y. Avishai, Phys. Rev. B **71**, 125311 (2005).
- [112] N. Sandler, H. Maei and J. Kondev, Phys. Rev. B **70**, 045309 (2004) .
- [113] S. Kirkpatrick and T.P. Eggarter, Phys. Rev. B **6**, 3598 (1972) .
- [114] A. Mookerjee, I. Das Gupta and T. Saha, Int. J. Mod. Phys. B **9**, 2989 (1995).
- [115] R. Raghavan, Phys. Rev. B **29**, 784 (1984).
- [116] T. Odagaki and K. C. Chang, Phys. Rev. B **30**, 1612 (1984).
- [117] Y. Shapir, A. Aharony and A.B. Harris, Phys Rev. Lett. **49**, 486 (1982).
- [118] L.J. Root, J.D. Bauer and J.L. Skinner, Phys Rev. B **37**, 5518 (1988).
- [119] C.M. Soukoulis, E.M. Ecomonou and G.S. Grest, Phys. Rev. B **36**, 8649 (1987).
- [120] Th. Koslowski and W. von Niessen, Phys. Rev. B **42**, 10342 (1990).
- [121] C.M. Soukoulis and G. S. Grest, Phys. Rev. B **44**, 4685 (1991)
- [122] C.M. Soukoulis, Q. Li and G. S. Grest, Phys. Rev. B **45**, 7724 (1992)

- [123] R. Abou-Chacra, P.W. Anderson and D.J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1734 (1973).
- [124] J. Friedel, Adv. Phys. **3**, 446 (1954).
- [125] K.C. Chang and T. Odagaki. J. Phys. A **20**, 1027 (1987).
- [126] R. Berkovits and Y. Avishai, Phys. Rev. B **53**, 16125 (1996).
- [127] A. Kaneko and T. Ohtsuki, J. Phys. Soc. Japan **68**, 1488(1999).
- [128] R.P.A. Lima and M.L. Lyra, Physica A **291**, 157 (2001).
- [129] R.P.A. Lima, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and H.N. Nazareno, Phys Rev. B **71**, 235112 (2005).
- [130] S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and A.J.F. de Souza, Phys. Rev. E **72**, 016116 (2005).
- [131] G.Schubert, A. Weiße and H.Fehske, Phys. Rev. B **71**, 045126 (2005).
- [132] M. Schreiber and H. Grussbach, Phys. Rev. Lett. **67**, 607 (1991) .
- [133] M. Janssen, Phys. Rep. **295**, 1 (1998) .
- [134] V.E. Kravtsov and K.A. Muttalib, Phys. Rev. Lett. **79**, 1913 (1997).
- [135] S.M. Nishigaki, Phys. Rev. E **59**, 2853 (1999).

# Capítulo 6

## Artigos publicados

*Sensitivity to initial conditions of the wave-packet dynamics in diluted Anderson chains*

S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and E. Lazo  
Physics Letters A **355**, 468 (2006).

*Vibrational modes in harmonic chains with diluted disorder*

S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra  
Physica A **266**, 465 (2005).

*Fractality of largest clusters and the percolation transition in power-law diluted chains*

S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and A.J. Souza  
Phys. Rev. E **72**, 016116 (2005).