

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

ROSA CAROLINA PINTO CARVALHO

**Propriedades de transporte eletrônico
em cadeias duplas com correlações
cruzadas**

Maceió - Brasil
Abril - 2012

ROSA CAROLINA PINTO CARVALHO

Propriedades de transporte eletrônico em cadeias duplas com correlações cruzadas

Dissertação apresentada no Instituto de Física da
Universidade Federal de Alagoas como requisito
necessário para a obtenção do título de
Mestre em Física.

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

Maceió - Brasil
Abril - 2012

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

C331p Carvalho, Rosa Carolina Pinto
Propriedades de transporte eletrônico em cadeias duplas com correlações cruzadas / Rosa Carolina Pinto Carvalho. - 2012.
49 f.: il. grafs.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura.
Dissertação (Mestrado em Física da Matéria Condensada) —
Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física, Maceió, 2017.

Bibliografia: f. 47 – 49.

1. Transporte eletrônico. 2. Desordem correlacionada. 3. Teoria de escala
I. Título

CDU: 538.935



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física

Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões
Cidade Universitária
Tabuleiro dos Martins
57072-970 Maceió - AL, Brasil
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

“Propriedades de Transporte Eletrônico em Cadeias
Duplas com Correlações Cruzadas”

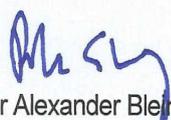
por

Rosa Carolina Pinto Carvalho

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Peter Alexander Bleinroth Schulz, do Departamento de Física da Universidade Estadual de Campinas, consideram a candidata aprovada com grau “A”.

Maceió, 04 de abril de 2012


Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Peter Alexander Bleinroth Schulz


Prof. Marcelo Leite Lyra

A meus pais.

Agradecimentos

Gostaria de dar meus sinceros agradecimentos a todos que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho.

Obrigada aos colegas do Instituto, cada um deles é único e especial. Obrigada aos colegas de almoço: Thaíla, com o jeitinho doce; Júlio, como jeitão calado; Giovana, com as curtas mais engraçadas... Obrigada a Wandearley e Socorro, o casal bom humor. Obrigada aos meus amigos de sala: Moniellen, por sempre me dar apoio quando eu mais precisava; e Thiaguinho, por ser um dos meus melhores amigos e eu ainda ter a sorte de vê-lo todos os dias. Obrigada ao amigo Chiquinho, pelo carinho e fazer parte da minha vida desde antes de entrar na física; e à amiga Lidiane, que já me acompanha há muito tempo.

Meu muito obrigada aos professores que contribuíram com a minha formação, em especial aos professores que lecionaram as disciplinas do meu mestrado: professor Marcelo, professor Iram, professor Thiago e professor Evandro. Um obrigada ainda maior, sem tamanho, incomensurável, ao professor Francisco por toda a paciência, dedicação, disponibilidade e força que me foi dada para a realização deste trabalho.

Por fim, agradeço à minha família, que, quando eu nasci, era composta por quatro pessoas e hoje somos dez! Obrigada ao meu marido, Italo. Agradeço aos meus pais por sempre me colocarem pra cima e nunca para baixo, por sempre estarem aqui comigo.

Agradeço a Deus. Quem sabe ele não tem algo a ver com isso?

Que ninguém se engane, só se consegue a simplicidade através de muito trabalho.

Clarice Lispector

Resumo

Neste trabalho de mestrado, foi estudada a dinâmica eletrônica em um modelo de Anderson com desordem diagonal correlacionada numa geometria do tipo cadeia dupla. Para impôr as correlações na distribuição de desordem, construímos as energias *on-site* a partir de regras de simetria e antissimetria entre as cadeias. A dinâmica de um pacote de onda inicialmente localizado foi investigado por meio da resolução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Nossos dados numéricos mostram que as correlações cruzadas simétricas têm pouco efeito sobre as propriedades de localização dos autoestados de uma partícula. Entretanto, as correlações antissimétricas levam efetivamente a uma redução da largura da desordem, especialmente no regime de acoplamento forte, resultando assim num aumento substancial da propagação do pacote de onda. Uma análise de tamanho finito mostra que a presença de correlações antissimétricas, apesar de enfraquecer a localização, não promove transporte balístico. Apresentamos também uma análise analítica que explica o efeito de correlações cruzadas na dinâmica eletrônica.

Palavras-chave: 1. Transporte eletrônico. 2. Desordem correlacionada. 3. Teoria de escala.

Abstract

In this work we study the wave-packet dynamics in a two-channel Anderson model with correlated diagonal disorder. To impose correlations in the disorder distribution we construct the on-site energy landscape following both symmetry and antisymmetric rules. The dynamics of an initially localized wave packet is investigated by solving numerically the time-dependent Schrödinger equation. Our numerical data show that symmetric cross correlations have a small impact on the degree of localization of the one-particle eigenstates. In contrast, antisymmetric correlations lead to an effective reduction of the degree of disorder, specially in the strong coupling regime, thus resulting in a substantial increase of the wave-packet spread. A finite size scaling analysis shows that antisymmetric cross correlations, in spite of weakening the localization, do not promote ballistic transport. Theoretical explanations to the effect of cross-correlations in the wave-packet dynamics are provided.

Keywords: 1. Electronic transport. 2. Correlated disorder. 3. Scaling theory. properties.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Sistemas puros, defeitos e correlações cruzadas	1
1.2	Modelos de Condução	8
1.2.1	Teoria de Banda	8
1.2.2	Transição de Mott	12
1.2.3	Modelo de Anderson e Teoria de Escala	15
2	MÉTODOS UTILIZADOS	22
2.1	Construção do Modelo	22
2.2	Método das Matrizes de Transferência	28
2.3	Funções de Green	32
2.4	Densidade de Estados	33
3	RESULTADOS	34
4	CONCLUSÃO	45
	REFERÊNCIAS	47

1

INTRODUÇÃO

1.1 Sistemas puros, defeitos e correlações cruzadas

Sistemas cristalinos se caracterizam por apresentar uma ordem de longo alcance que favorece a locomoção de elétrons por toda a sua extensão, especialmente em baixas temperaturas, possuindo assim características metálicas. Um cenário distinto ocorre quando impurezas são inseridas nestes sistemas, onde o surgimento de defeitos na rede cristalina tende a dificultar a locomoção dos elétrons, induzindo assim um comportamento isolante no sistema.

Estudos recentes mostram que a existência de correlações entre as impurezas dos sítios que compõem uma rede podem interferir nas propriedades eletrônicas da mesma, facilitando o deslocamento dos elétrons dentro dela. Desta forma, um sistema desordenado pode apresentar propriedades condutoras.

Para compreender melhor essa discussão, vamos inicialmente falar sobre os sistemas puros e as causas que podem comprometer suas propriedades eletrônicas. Sistemas cristalinos apresentam uma estrutura em que seus átomos, moléculas ou íons formam redes periódicas, ou seja, estão localizados em pontos com orientações e arranjos que parecem ser exatamente os mesmos independente do ponto da rede no qual eles se encontrem. Este tipo de rede é conhecida como rede de Bravais [1] e possui uma propriedade que chamamos de simetria translacional.

Os cristais são exemplos de sistemas ordenados e possuem potencial periódico, ou seja:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}) \quad (1.1)$$

onde \vec{R} é um vetor típico da rede de Bravais ¹.

As funções de onda de um elétron em um cristal perfeito são encontradas solucionando-se a equação de Schrödinger:

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = E\psi \quad (1.2)$$

onde $U(\vec{r})$ é o potencial periódico dado por (1.1). Para o caso do elétron livre, quando não são consideradas as interações de um elétron com os íons da rede e com outros elétrons, temos $U(\vec{r}) = 0$.

Os elétrons independentes que obedecem à equação acima com um potencial periódico são chamados elétrons de Bloch e suas soluções, ondas de Bloch. Damos o nome de condutor aos sistemas em que as ondas de Bloch são estendidas em todo o material.

Em decorrência da ordem periódica de longo alcance, os cristais possuem grande simetria translacional, de forma que há a emergência de correlações longo alcance nestes sistemas, caracterizando a fase metálica da substância. À medida que impurezas ou defeitos são acrescentados à rede, as simetrias translacionais vão sendo quebradas, resultando em barreiras que dificultam a passagem dos elétrons. Nestas condições, a substância se torna menos condutora ou até isolante. Isto ocorre porque cada impureza representa uma barreira de energia potencial diferente. A cada nova barreira, parte da função de onda eletrônica é transmitida enquanto outra parte é refletida. Na região entre duas barreiras poderá existir duas ou mais ondas refletidas e refratadas. Esta combinação pode resultar em interferências construtivas ou destrutivas, a depender da diferença de fase existente entre as ondas. Muitas impurezas presentes na rede significam muitas barreiras para a passagem dos elétrons. Desta forma, as ondas refletidas e refratadas não possuem coerência de fase, resultando em interferências destrutivas e consequente localização exponencial dos elétrons. Nesta configuração, o sistema é isolante [2].

As quebras de simetria podem ocorrer por diversos motivos, como vibrações térmicas ou tensões e compressões sofridas pelo cristal. Elas podem ocorrer uma dimensão (defeitos

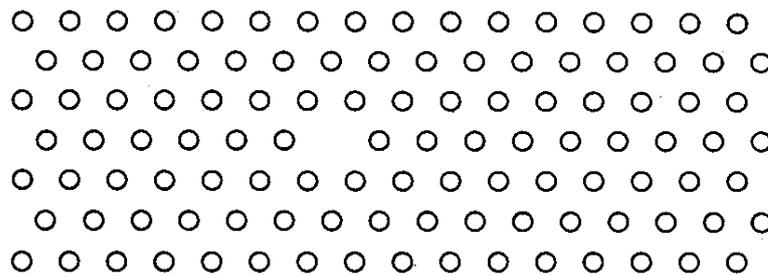
¹Um vetor tridimensional da rede de Bravais possui a forma $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, onde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são três vetores que não estão todos no mesmo plano e n_1 , n_2 e n_3 assumem todos os números inteiros [1].

pontuais), duas dimensões (defeitos lineares) ou três (defeitos planares). No local onde o defeito é encontrado, o arranjo microscópico dos íons, átomos ou moléculas é drasticamente diferente do arranjo de um cristal perfeito.

Os cristais encontrados na natureza e os fabricados em laboratório sempre possuem defeitos. Alguns tipos de defeitos mais comuns são:

- **Vacâncias:** Defeitos pontuais caracterizados pela ausência de íons na rede cristalina. Este defeito é responsável pela condutividade elétrica de cristais iônicos e pode alterar suas propriedades óticas, como a cor do cristal, por exemplo. Quanto maiores as vibrações, mais fácil fica a saída de um átomo da estrutura formando uma vacância.

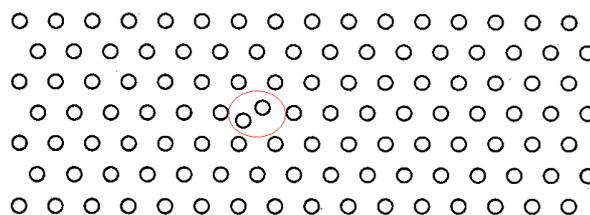
Figura 1.1: Uma porção de uma rede de Bravais monoatômica contendo uma vacância.



Fonte: Autora, 2012.

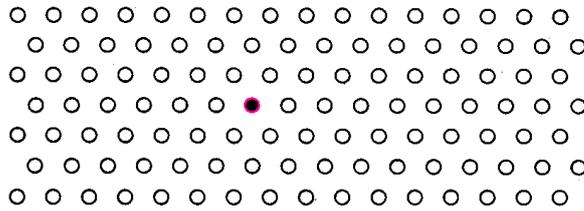
- **Defeitos intersticiais:** Ocorrem quando há um átomo extra na estrutura. Estes defeitos também alteram as propriedades elétricas e óticas do cristal.

Figura 1.2: Uma porção de uma rede de Bravais monoatômica contendo defeito intersticial.



Fonte: Autora, 2012.

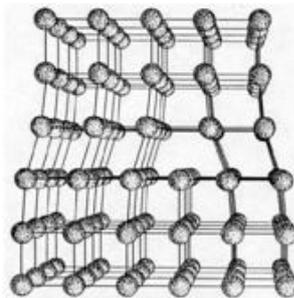
Figura 1.3: Uma porção de uma rede de Bravais monoatômica contendo uma impureza substitutiva.



Fonte: Autora, 2012.

- Impureza substitutiva: Quando um átomo diferente substitui diretamente um átomo que forma o cristal.
- Deslocações: Quando toda uma sequência de átomos se desloca, criando uma deformação ao seu redor. Este defeito explica a coesão dos cristais reais, pois quanto mais os cristais se aproximam da perfeição, mais fracos eles se tornam. É normalmente criado por tensões causadas por efeitos térmicos ou mecânicos. Este defeito só é perceptível nas regiões próximas a ele. Longe do defeito, a rede parece uma estrutura perfeita.

Figura 1.4: Exemplo de deslocação.



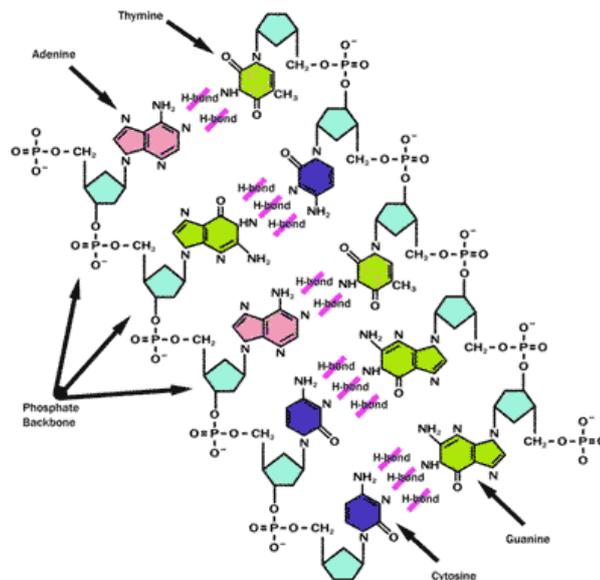
Fonte: Ashcroft, 1979 [1].

A energia para criar um defeito pontual é de poucos elétron-volts, enquanto a energia para criar uma deslocação é de aproximadamente 100 elétron-volts. Por esta razão, defeitos pontuais são os defeitos mais comumente encontrados. Defeitos planares necessitam de energias ainda maiores para existir sendo então mais raros. Outra forma ainda

de dificultar a passagem de elétrons na rede é distribuir átomos ou moléculas em posições aleatórias. Quanto maior for a concentração de impurezas, maior é a desordem, independente do papel individual da impureza para coesão cristalina [3].

A forma como as impurezas são distribuídas também pode interferir, facilitando ou dificultando a passagem de elétrons. A existência de correlações de curto e/ou longo alcance entre essas impurezas pode favorecer o alargamento da função de onda do elétron, tornando a substância mais condutora. Este é um assunto que vem gerando muitos debates na física do estado sólido desde 1990, com o trabalho pioneiro de Dunlap e colaboradores [4]. Nosso objetivo principal neste trabalho é investigar o papel desempenhado pelas desordens correlacionadas no transporte eletrônico.

Figura 1.5: Estrutura química da molécula de DNA mostrando as moléculas de fosfato intercaladas com pentoses.

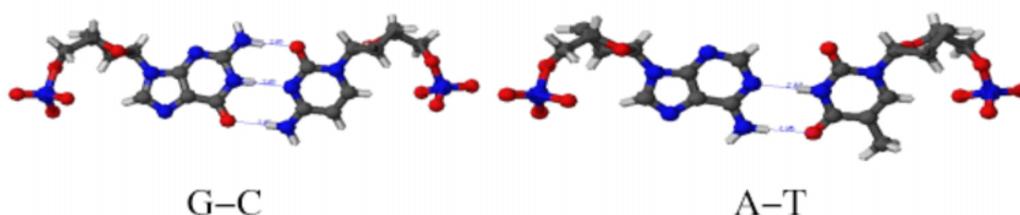


Fonte: www.molecularstation.com/images.

Um tipo de correlação muito conhecida é o emparelhamento de bases existente nas moléculas de DNA (ácido desoxirribonucleico), a molécula que carrega todas as informações genéticas dos seres vivos. Como sabemos, o DNA é formado por duas fitas dispostas helicoidalmente. Cada fita é composta por moléculas de fosfato intercaladas por moléculas de açúcar (pentose) às quais estão ligadas bases nitrogenadas, que podem ser Timina, Citosina, Guanina ou Adenina. Ao conjunto formado por um açúcar, uma base e um

fosfato dá-se o nome de nucleotídeo. As duas fitas do DNA são interligadas por meio de ligações do tipo pontes de hidrogênio existentes entre as bases nitrogenadas. A Adenina e a Timina podem fazer duas ligações de pontes de hidrogênio, enquanto a Citosina e a Guanina podem fazer três. Por esta razão, a Adenina sempre se liga à Timina e a Citosina sempre se liga à Guanina, formando assim uma correlação cruzada entre as fitas do DNA.

Figura 1.6: Os dois possíveis pares de bases nitrogenadas. São três ligações do tipo pontes de hidrogênio para o par Guanina e Citosina e duas para o par Timina e Adenina.

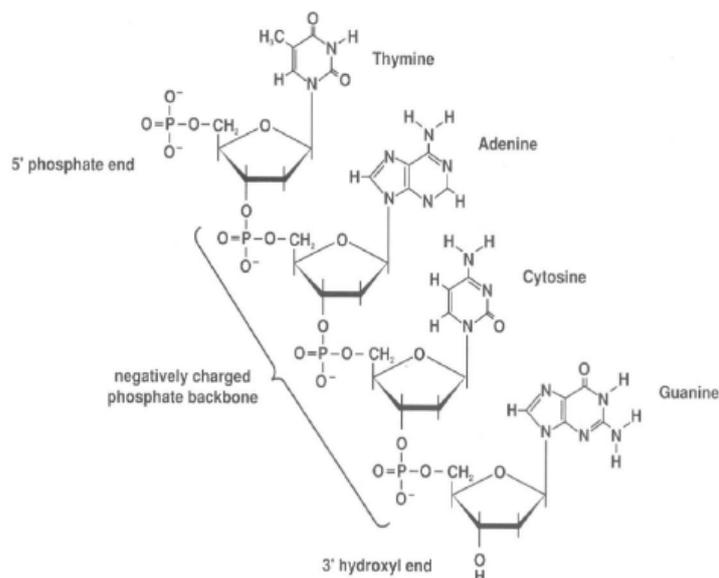


Fonte: Endres, 2004 [6].

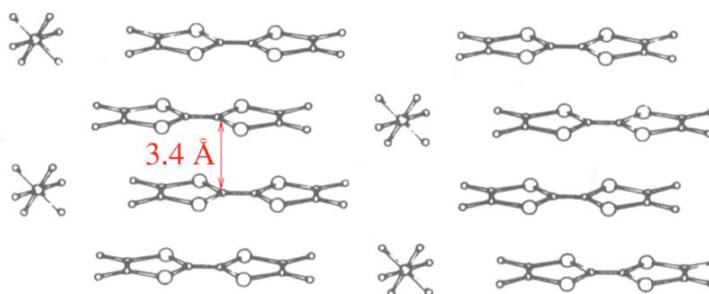
Ultimamente, a molécula de DNA vem chamando a atenção de físicos e químicos por seu potencial uso na tecnologia. Uma forma condutora de DNA causaria grandes impactos no desenvolvimento de circuitos nanoeletrônicos e também na biologia, ajudando no entendimento dos processos de detecção de danos e reparação de moléculas de DNA danificadas por oxidação ou através da transferência de longo alcance de cargas. Entretanto, as propriedades eletrônicas do DNA parecem ainda estar muito longe de serem desvendadas, pois medidas de condutividade e reações de transferência de cargas mostram um grande número de comportamentos possíveis [6]. Começou-se a pensar no DNA como um material condutor em um estudo de 1962 quando Eley e Spivey sugeriram que as bases aromáticas do DNA poderiam levar a uma hibridização dos orbitais π paralelos ao plano das ligações entre as bases levando a um possível comportamento condutor [7].

Existem cristais aromáticos metálicos parecidos com o DNA que reforçam essa teoria, como os sais de Bechgaard, que são condutores [6].

Muitos são os fatores que interferem na condutividade ao longo das moléculas de DNA.

Figura 1.7: Molécula de DNA com as bases aromáticas.

Fonte: Endres, 2004 [6].

Figura 1.8: Sais de Bechgaard, $(TMTSF)_2PF_6$, um cristal aromático condutor.

Fonte: Endres, 2004 [6].

Dificultando a condutividade, temos que o DNA biológico não possui a periodicidade dos cristais e, agravando a situação, o meio onde o DNA está imerso (água e íons que são atraídos pelos grupos fosfato, que são negativos) exercem forças que contribuem para um aparente meio aleatório. A favor da condutividade, foi descoberto que o DNA possui uma correlação de longo alcance [8] e, conforme já foi dito, existem estudos que apontam que as correlações podem favorecer o transporte eletrônico. O comportamento eletrônico do DNA até hoje ainda é muito controverso. Ele já apareceu como isolante em temperatura ambiente [9, 10, 11, 12, 13], semicondutor [14, 15], com comportamento ôhmico [16] e até supercondutor [17, 18]. Estas variações de comportamento são devidas a inúmeros

fatores como o meio onde o DNA está inserido, possíveis correlações de longo alcance entre as moléculas, suas vibrações moleculares ou a própria sequência de nucleotídeos que o constitui. Existe também, por outro lado, a possibilidade de dopar o DNA com elétrons, átomos ou buracos como se faz com semicondutores dopados.

Nosso trabalho refere-se a como as correlações cruzadas, semelhantes às correlações do DNA, podem interferir na passagem dos elétrons pela rede. Assim sendo, faremos agora uma breve discussão sobre as características dos sistemas isolantes e metálicos, dos tipos de transições metal-isolante e da Teoria de Escala proposta por Anderson.

1.2 Modelos de Condução

O fenômeno de localização-delocalização refere-se à dinâmica dos elétrons nas redes. Elétrons que ocupam apenas uma pequena região do espaço possuem suas funções de onda exponencialmente localizadas, diminuindo sua amplitude à medida que a distância a esta região aumenta. Assim, eles não podem contribuir com o transporte eletrônico no zero absoluto de temperatura, quando todos os acoplamentos a outros graus de liberdade como fônons e interações partícula-partícula se tornam negligíveis. Já os elétrons com funções de onda estendidas ficam espalhados na rede podendo escapar para o infinito, contribuindo para o transporte eletrônico mesmo em zero absoluto de temperatura. Como consequência, se só existirem estados localizados próximos da energia de Fermi, o sistema será isolante e não existirá condutividade em $T = 0$; e, quando a energia de Fermi se encontrar na região das funções de onda estendidas, o sistema será metálico com condutância finita. [3]

Iremos fazer um breve resumo sobre os principais modelos referentes aos fenômenos de transição metal-isolante e localização-delocalização do pacote de onda eletrônico.

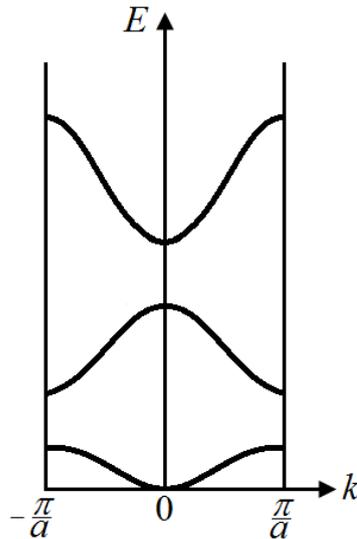
1.2.1 Teoria de Banda

A Teoria de Banda, ou de Bloch, trata sobre cristais e assume que existe um conjunto

de estados estacionários disponíveis para qualquer elétron, dados pela solução da equação de Schrödinger $H\psi_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}}\psi_{n\mathbf{k}}$, e que todos os elétrons estão distribuídos nestes estados de acordo com a estatística de Fermi-Dirac. O Hamiltoniano da equação de Schrödinger possui um termo para a energia cinética e um termo de potencial $V(x)$, o qual representa a interação de um elétron com todas as outras partículas do cristal. Sabemos que na estrutura cristalina existe uma simetria translacional, isto é, se a é a constante de rede, temos $V(x + a) = V(x)$, assim o Hamiltoniano também é periódico. Os autoestados de H são escolhidos de forma que:

$$\psi(x + a) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\psi(x) \quad (1.3)$$

Figura 1.9: Energia versus vetor de onda k . Podemos ver que, para um mesmo k , existem diferentes valores de energia.



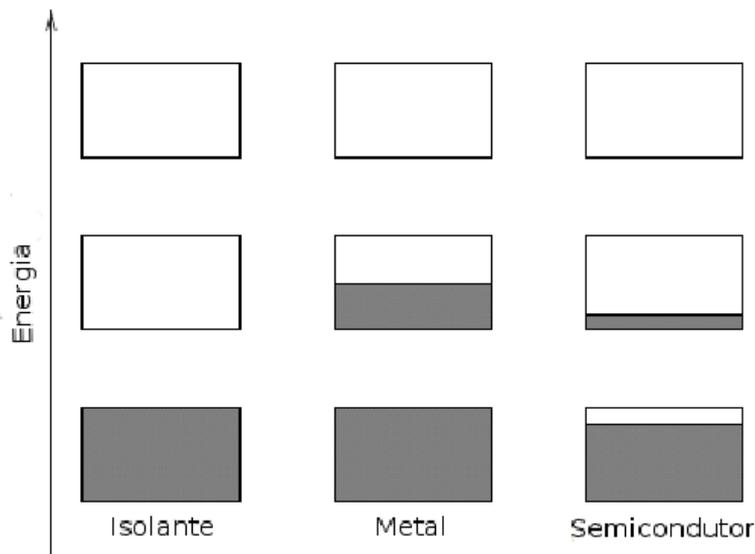
Fonte: Kittel, 2006 [20].

O vetor de onda \vec{k} , com $-\pi/a < \vec{k} < \pi/a$, é o número quântico que está associado às condições de contorno do potencial periódico do sistema. O índice de banda n é um número inteiro e serve para diferenciar as autoenergias que satisfazem a equação de Schrödinger para um único \vec{k} . A figura 1.9 ilustra as diferentes autoenergias para o mesmo valor de k , para um cristal unidimensional.

Cada banda pode acomodar $2N$ elétrons, onde N é o número de células unitárias e

o fator 2 é devido à degenerescência do spin [19]. Na teoria de Bloch, um sólido é um isolante quando cada banda está completamente cheia ou completamente vazia e a fase metálica aparece quando, pelo menos, uma banda está parcialmente cheia. Uma ilustração simplificada pode ser vista na figura 1.10.

Figura 1.10: Níveis de energia permitidos para um isolante, metal e semicondutor. As regiões sombreadas representam a ocupação dos elétrons. Como podemos ver, o isolante possui a banda de valência completamente preenchida e todas as outras completamente vazias. Já em um metal, a banda de valência é completamente preenchida mas a banda de condução é parcialmente preenchida. No caso de um semicondutor, a banda de valência não é completamente, enquanto a banda de condução é pouco preenchida.

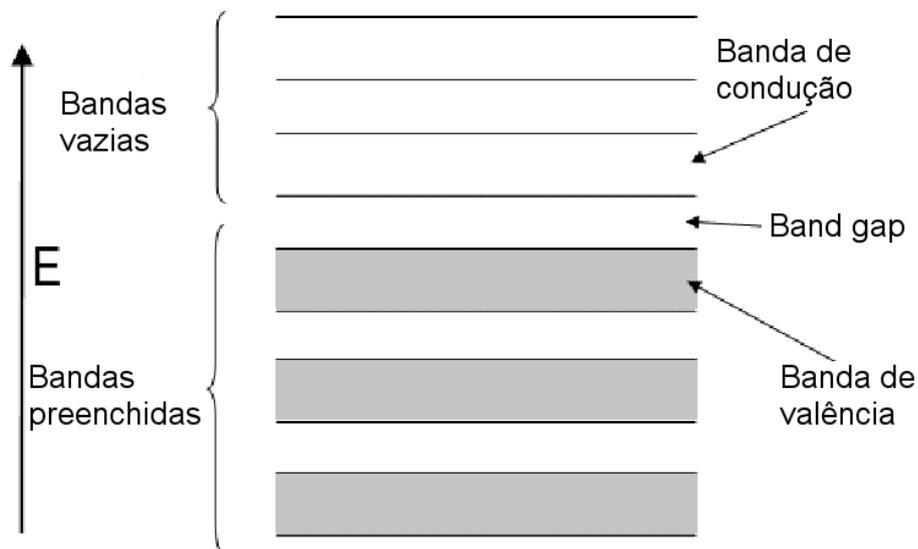


Fonte: Adaptado de Kittel, 2006 [20].

Quando um certo número de bandas está completamente preenchido e todas as outras bandas estão completamente vazias, temos o que chamamos de banda proibida ou *band gap*, isto é, a diferença de energia entre o nível ocupado mais alto e o nível desocupado mais baixo. Como o número de níveis numa banda é igual ao número de células primitivas do cristal e cada nível pode acomodar dois elétrons, sendo um para cada spin, para haver *band gap* é necessário haver um número ímpar de elétrons por cada célula unitária.

Quando o *band gap* é muito maior que $k_B T$, com T próximo à temperatura ambiente, o sólido é isolante e quando o *band gap* é comparável a $k_B T$, o sólido é um semicondutor intrínseco. No caso de existirem bandas parcialmente preenchidas, a energia de Fermi (energia do nível ocupado mais alto) se encontra dentro da faixa destas bandas. Para

Figura 1.11: Esquema simplificado do *bandgap*.



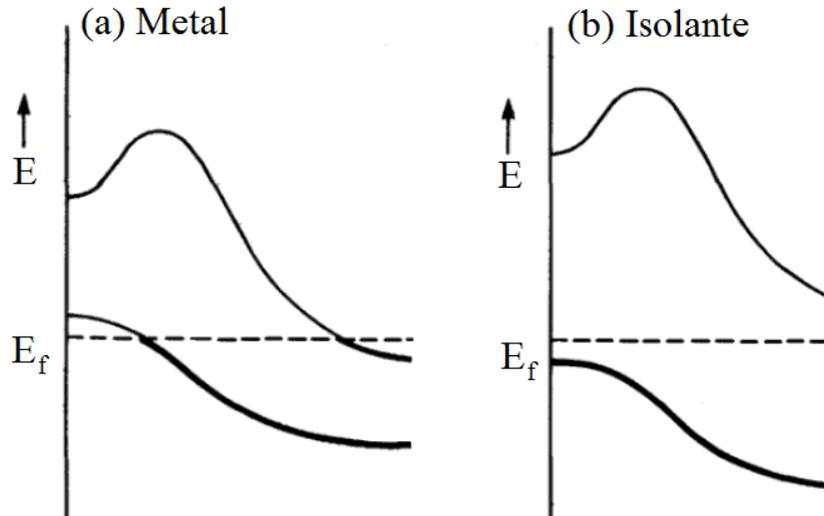
Fonte: Autora, 2012.

cada banda parcialmente preenchida, existe uma superfície no espaço k separando os níveis ocupados dos desocupados. O conjunto formado por todas essas superfícies é conhecido como superfície de Fermi e um sólido possui propriedades metálicas quando esta superfície existe.

A transição metal-isolante no modelo de Bloch ocorre quando algum fator, como variação da temperatura ou pressão, causa uma mudança na estrutura de banda de forma a eliminar a sobreposição existente entre as bandas cheias e vazias, conforme podemos ver na figura 1.12. Para o metal, a energia de Fermi se encontra entre duas bandas que estão parcialmente cheias. Já para o isolante, a energia de Fermi fica entre duas bandas que não se tocam devido à existência de uma energia de *gap* separando a banda de valência (banda mais alta cheia) da banda condutora (banda mais baixa vazia).

Neste tipo de transição, os dois lados, metálico e isolante, possuem funções de onda estendidas com amplitude considerável ao longo de todo o sólido. Para cristais, estas são conhecidas como funções de Bloch, conforme falamos anteriormente. Entretanto, quando tratamos de sólidos amorfos, que não possuem forma definida nem a periodicidade dos cristais, o número quântico k perde sua validade, uma vez que ele está relacionado à

Figura 1.12: Transição metal-isolante para a teoria de Bloch.



Fonte: Zallen, 1998 [19].

periodicidade do sistema. Assim, devido à falta de correlação de longo alcance, a teoria de banda falha para sólidos amorfos.

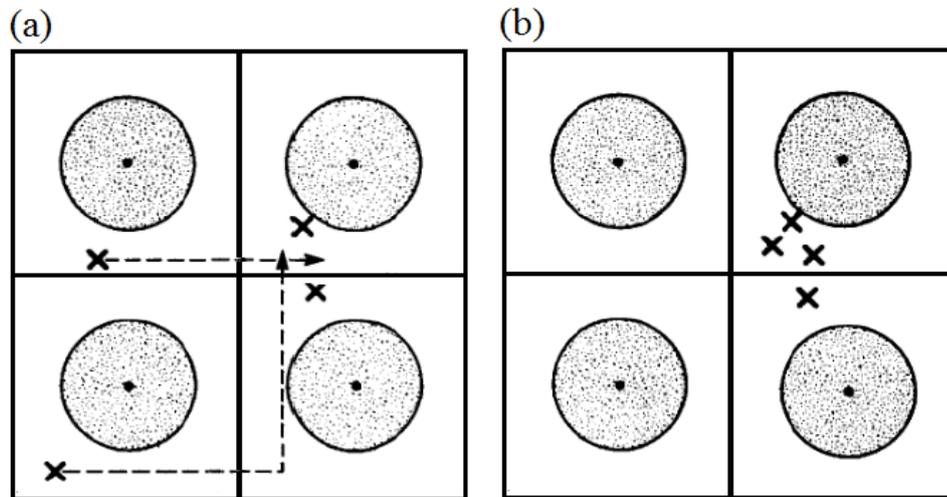
Veremos mais tarde que a transição mais adequada para tratar os sólidos amorfos é a transição de Anderson. A teoria de banda falha também para determinados sistemas periódicos com propriedades isolantes. Considere um sistema monoatômico hipotético composto por átomos com apenas um elétron fora de uma casca fechada (como os metais alcalinos, por exemplo) com uma constante de rede muito grande, digamos um metro. Obviamente, este sólido não será condutor, pois estamos lidando com uma série de átomos isolados. Entretanto, a teoria de banda prevê que ele é um metal, uma vez que existe periodicidade translacional e a banda mais alta está parcialmente cheia. A teoria de Mott resolve este tipo de problema.

1.2.2 Transição de Mott

Considere as duas configurações eletrônicas mostradas na figura 1.13. As bolas representam átomos e os \times representam elétrons. No caso de elétrons independentes, as duas configurações possuem a mesma energia potencial, já que os elétrons de valência apenas translacionaram para posições equivalentes em outros átomos. Entretanto, sabemos que

existe uma interação coulombiana repulsiva entre os elétrons, dada por e^2/r_{12} para cada par. Nos sólidos reais, os elétrons tendem a correlacionar seus movimentos de forma a evitarem uns aos outros pois a proximidade entre eles é energeticamente desfavorável.

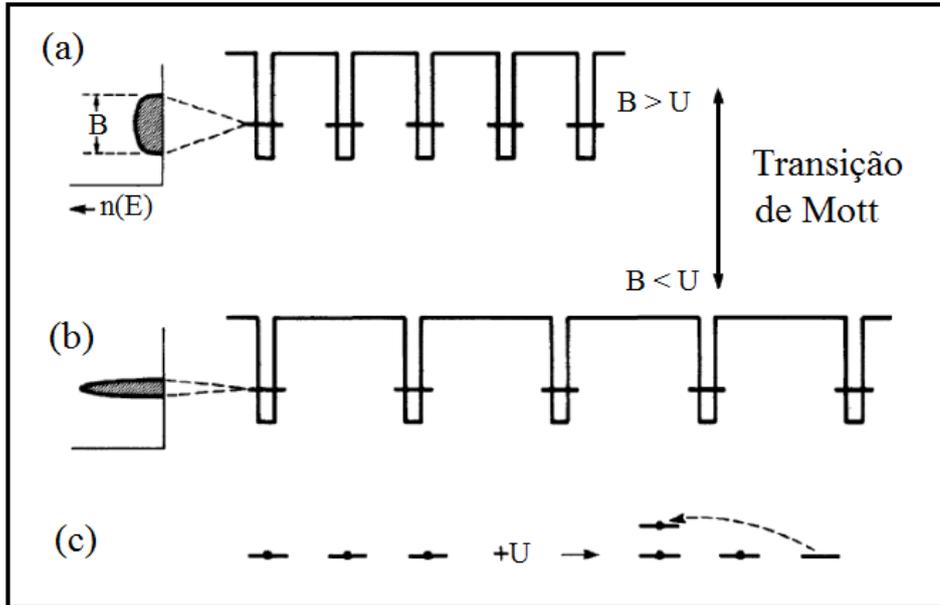
Figura 1.13: Duas configurações eletrônicas com energias diferentes. As bolas representam os átomos e os \times representam os elétrons.



Fonte: Zallen, 1998 [19].

O montante pelo qual a teoria de banda superestima a energia do estado fundamental do sistema negligenciando as correlações eletrônicas é chamada energia de correlação. Essa energia de correlação pode, sob certas circunstâncias, levar um sólido a ter um estado fundamental isolante enquanto a teoria de banda levaria erroneamente a tratá-lo como um metal. Um sólido deste tipo é conhecido como isolante de Mott [19]. Para simplificar o que foi exposto acima, vejamos a figura 1.14, onde os poços potenciais representam os sítios atômicos e as listras horizontais representam o nível de energia vinculado ao estado ocupado pelo elétron de valência de cada átomo (aqui iremos tratar de um átomo com apenas um elétron de valência, ou seja, uma banda parcialmente preenchida). No cristal, esse nível de energia dá origem a um comprimento de banda B , como podemos ver na parte esquerda da figura. Para o átomo livre, a banda cristalina possui energias entre $-B/2$ e $+B/2$. Como estamos tratando de uma banda parcialmente cheia, a média da energia do elétron de valência do cristal é $-B/4$. Esta diferença de energia se deve à redução na energia cinética que vem da delocalização dos elétrons no cristal, sendo,

Figura 1.14: Transição de Mott. O distanciamento dos átomos diminui a largura de banda B , favorecendo a localização eletrônica. Na letra c , vemos um elétron saltando para um orbital já ocupado por meio da adição de uma energia U .



Fonte: Zallen, 1998 [19].

assim, responsável pela coesão metálica. Com o aumento da constante da rede, a largura da banda diminui, chegando a sumir no limite atômico $a \rightarrow \infty$.

Voltando a falar sobre a energia de correlação, temos que a energia para ocupar o mesmo átomo com dois elétrons de valência é a mesma que a média da energia de Coulomb dada por $\langle e^2/r_{12} \rangle$ e aqui chamaremos de U . O diagrama de dois níveis mostrado em 1.14c ilustra esta energia. Cada nível de energia dos elétrons de valência de cada átomo isolado representado pelas linhas horizontais nas figuras 1.14a e 1.14b é duplamente degenerado e pode acomodar nenhum, um ou dois elétrons de spins contrários. A existência de dois elétrons no mesmo orbital só ocorre diante de um aumento U na energia e quando todos os outros níveis mais baixos estão completos. As probabilidades de encontrar sítios desocupados, ocupados por um elétron de valência e dois elétrons de valência são, respectivamente, $1/4$, $1/2$ e $1/4$. O aumento de energia pela quantidade U dá um custo de energia potencial por elétron de $U/4$. Comparando com a média da energia cinética $B/4$, temos que os custos da energia de correlação excedem o ganho da delocalização se $U > B$, havendo uma localização dos elétrons. Este é o típico caso de quando a energia

potencial ganha da energia cinética no regime de baixa densidade. A transição de Mott ocorre quando há mudanças nas distâncias entre os átomos de forma a variar os valores de B e U . A transição de Mott difere da transição de Bloch por ser uma transição do tipo delocalização \leftrightarrow localização dos estados eletrônicos, enquanto a segunda é uma transição do tipo metal \leftrightarrow isolante.

1.2.3 Modelo de Anderson e Teoria de Escala

Conforme falamos anteriormente, o modelo de Anderson é o modelo mais adequado para sólidos amorfos. Ele foi formulado em 1958 e sua transição metal-isolante refere-se, assim como a transição de Mott, a funções de onda eletrônicas estendidas ou localizadas. Nele, em temperatura $T=0$ e considerando apenas a interação dos elétrons com os íons ou átomos da rede, sem interações coulombianas entre os elétrons, foi mostrado quantitativamente que a presença de uma desordem suficientemente forte pode levar à ausência de difusão em determinadas redes [21]. Esta desordem pode ser observada fisicamente como sendo vacâncias, deslocamentos ou impurezas na rede cristalina. Outra opção é distribuir átomos ou moléculas em posições mais ou menos aleatórias levando à existência de potenciais desordenados [22]. Neste trabalho, foi tomada uma rede com n sítios distribuídos de maneira regular ou aleatória no espaço tridimensional. Ocupando cada sítio, existem entidades, que podem ser spins de elétrons ou outras partículas. Se uma entidade ocupa o sítio i , ela possui energia ϵ_i , a qual é uma variável estocástica distribuída sobre uma banda de energia completamente aleatória no intervalo $[-W/2, W/2]$, assim a largura da desordem é W . Entre os sítios, existe uma energia de interação, que pode ou não ser estocástica, dada pelo elemento de matriz T_{ij} . Esta é a energia que transfere uma entidade do sítio i para o sítio j e decai muito rapidamente com a distância. O objetivo era estudar o comportamento da função de onda de uma entidade inicialmente localizada num sítio i ao longo do tempo. Usando a aproximação *tight-binding*, o Hamiltoniano de Anderson

para uma dimensão pode ser escrito como:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} T_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (1.4)$$

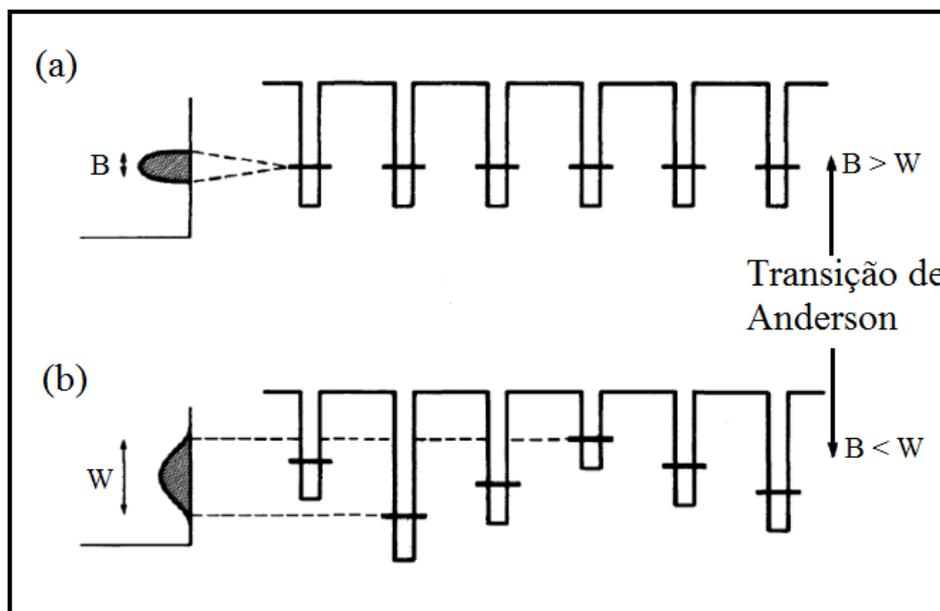
Ou, na forma matricial:

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & T_{1,2} & T_{1,3} & T_{1,4} & \dots & T_{1,n-1} & T_{1,n} \\ T_{2,1} & \epsilon_2 & T_{2,3} & T_{2,4} & \dots & T_{2,n-1} & T_{2,n} \\ T_{3,1} & T_{3,2} & \epsilon_3 & T_{3,4} & \dots & T_{3,n-1} & T_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ T_{n-1,1} & T_{n-1,2} & T_{n-1,3} & T_{n-1,4} & \dots & \epsilon_{n-1} & T_{n-1,n} \\ T_{n,1} & T_{n,2} & T_{n,3} & T_{n,4} & \dots & T_{n,n-1} & \epsilon_n \end{bmatrix}$$

Para o caso cristalino, ou seja, sem desordem, temos $W = 0$ e as energias ϵ_i podem ser igualadas a zero nos dando uma matriz com a diagonal principal nula. Conforme foi mostrado no trabalho de Anderson, não ocorre transporte eletrônico se T_{ij} cai com longas distâncias mais rápido que o inverso da distância ao cubo, $1/r^3$, e se o valor médio de T é menor que um certo valor crítico, W_c , da ordem de magnitude da desordem, W . Desta forma, a amplitude da função de onda em torno do sítio n cai rapidamente com a distância. Quando o grau de desordem é da mesma ordem das energias T_{ij} , o transporte finalmente pode ocorrer por meio de múltiplos saltos virtuais de um sítio para outro. Podemos dizer, de outra maneira, que, quando a largura da banda de energias permitidas ao elétron B ($B = 2zT$, onde z é o número de coordenação, ou seja, de primeiros vizinhos) é muito menor que o grau da desordem W , ou seja $\frac{W}{B} \gg 1$, o transporte eletrônico não ocorre. Quando a desordem e a largura de banda das energias dos elétrons são da mesma ordem $\frac{W}{B} \approx 1$, podem coexistir fases metálicas e fases isolantes. Mais necessariamente, ocorre uma transição metal-isolante quando $W = W_c$ e existem estados estendidos para $W < W_c$.

Na figura 1.15, temos uma representação esquemática da transição de Anderson. Os poços potenciais representam os sítios atômicos e as barras horizontais, os níveis de energia. Como podemos ver, em 1.15a, temos uma rede cristalina, pois as profundidades dos

Figura 1.15: Transição de Anderson. A localização induzida aparece quando o tamanho da desordem W excede o comprimento de banda B .



Fonte: Zallen, 1998 [19].

poços são as mesmas. Percebemos pela figura que, neste caso, $W = 0$. Já a figura 1.15b, é referente a um sólido amorfo, conforme indicam as diferentes profundidades dos poços potenciais e consequentes níveis de energia variados. A magnitude da desordem pode ser facilmente vista como a diferença nos níveis de energia.

Conforme foi mostrado na Teoria de Escala apresentada posteriormente, em 1979 [23], por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan, esta transição metal-isolante só seria possível para sistemas com dimensão maior que dois. Em sistemas com dimensão menor ou igual a dois, era esperado que todos os estados fossem localizados.

A Teoria de Escala é baseada numa única quantidade característica adimensional, a condutância generalizada g em temperatura zero, que vem a ser o inverso do parâmetro da desordem. A condutância generalizada também pode ser chamada de “número de Thouless” por ter sido inicialmente introduzida por Thouless em 1974 [33]. A partida da Teoria de Escala é um sólido formado por muitas caixas de volume L^d cada uma, onde d é a dimensão e L é muito maior do que o tamanho microscópico. As caixas são compostas por muitos sítios e estão acopladas umas às outras. Considere agora que as energias características do modelo de Anderson, W e t , sejam respectivamente

mapeados no espaçamento médio entre os níveis, ΔE , e no deslocamento δE causado pela mudança nas condições periódicas de contorno, dadas por $\psi(n+1) = \psi(1)$, por condições antiperiódicas de contorno, $\psi(n+1) = e^{i\chi} \times \psi(1)$. Aqui, χ é um número pequeno.

As razões $\frac{\Delta E}{\delta E}$, W/T e $1/g$ são referentes ao grau da desordem do sistema e podem ser relacionadas por:

$$\frac{1}{g(L)} = \frac{\Delta E}{\delta E} \quad (1.5)$$

Estados estendidos são sensíveis às condições de contorno, enquanto estados localizados são insensíveis a tais mudanças.

Como estamos no contexto de limite macroscópico, podemos escrever, pelo princípio da incerteza:

$$\delta E = \hbar/t_D \quad (1.6)$$

onde t_D é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos da caixa [2].

Considerando que o elétron realiza um movimento browniano dentro da caixa, temos:

$$t_D = L^2/D \quad (1.7)$$

onde D é a constante de difusão.

A condutividade pode ser obtida pela Relação de Einstein:

$$\sigma = e^2 D n(E) \quad (1.8)$$

com $n(E)$ sendo a densidade de estados média que pode ser escrita como uma função do espaçamento médio entre os níveis:

$$n(E) = \frac{1}{L^d dE/dN} \quad (1.9)$$

Unindo as equações 1.6, 1.7 e 1.8, obtemos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2(L^2 n(E))} \quad (1.10)$$

Como podemos ver, da equação 1.9:

$$\delta E = \frac{1}{n(E)L^d} \quad (1.11)$$

Assim, é possível tomar as duas últimas equações e substituir na equação 1.5 para chegar ao número de Thouless:

$$g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2} \quad (1.12)$$

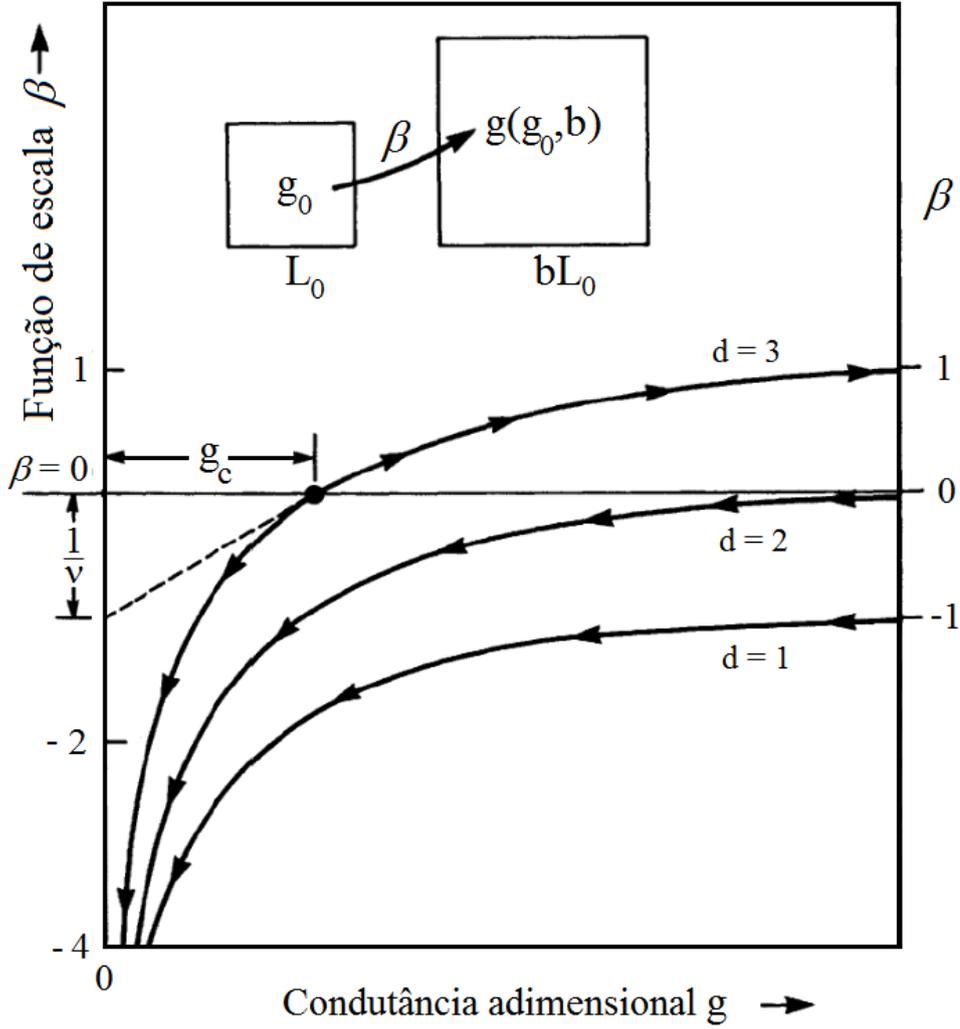
Aqui, σL^{d-2} é a condutância G em um cubo de d dimensões com lado L e condutividade σ .

Como podemos ver, o número de Thouless g é uma função da escala L . A Teoria de Escala estuda justamente a dependência de g com o comprimento de escala utilizado. Para caixas de volume L_0^d , por exemplo, temos um determinado valor da condutância generalizada $g_0 = g(L_0)$. Para uma outra caixa de lados $L = bL_0$, é possível, pela Teoria de Escala, obter o valor da nova condutância g exclusivamente pelos valores de g_0 e do fator de escala b . Se b for tratado como uma transformação contínua, isto é $b = 1 + \varepsilon$, com $\varepsilon \ll 1$, teremos que o comportamento da condutância g com o comprimento de escala L é dada pela função $\beta(g)$ definida por:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.13)$$

Se tivermos β positivo, significa que g cresce à medida que L cresce; enquanto um β negativo indica um decréscimo de g com o crescimento de L . Supondo que $\beta(g)$ tenha um comportamento monotônico e uma variação lenta entre os limites $g \rightarrow 0$ e $g \rightarrow \infty$, é esperado que, para uma, duas e três dimensões, se tenha o comportamento mostrado na figura 1.16, onde temos β em função de g .

Figura 1.16: Comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para uma, duas e três dimensões.



Fonte: Zallen, 1998 [19].

Como podemos ver, no limite de g muito grande ($\frac{T}{W} \gg 1$), temos, pelas equações 1.12 e 1.13:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2 \quad (1.14)$$

Desta forma, no limite de fraca desordem, β assume valor -1 em uma dimensão, 0 em duas dimensões e $+1$ em três dimensões. Já para valores muito pequenos de g ($\frac{T}{W} \ll 1$), temos fraco acoplamento e forte desordem que levam a estados eletrônicos localizados decaindo exponencialmente com a distância:

$$g \propto e^{-\rho L} \quad (1.15)$$

Pela equação 1.13, vemos que, quando $g \rightarrow 0$, o valor de β se aproxima de $-\infty$, não havendo assim transporte eletrônico em nenhuma dimensão. As setas que podem ser visualizadas no diagrama de fluxo indicam o comportamento de g com a variação de L para uma, duas e três dimensões. Podemos perceber que, para uma e duas dimensões, as setas sempre apontam para uma direção, ou seja, g sempre diminui com o aumento de L . Já para três dimensões, temos dois comportamentos possíveis: abaixo de um certo g_c ($\beta(g) < 0$), quando a condutância diminui à medida que L aumenta, o mesmo visto nas outras dimensões; e acima de g_c , quando g cresce com o aumento de L . O ponto g_c quando $\beta(g) = 0$ é chamado ponto fixo instável. Este comportamento dúbio para três dimensões é justamente a transição metal-isolante, pois, para valores de g menores que g_c , a condutividade tende a zero, enquanto, para valores de g maiores que g_c , é possível a existência de estados estendidos. O valor de g_c permanece o mesmo independente da mudança de escala. Por meio deste diagrama, também podemos observar que, em uma dimensão, o valor de β sempre é negativo, assim, todos os valores de g fluem para o limite localizado $g = 0$, concordando com a teoria de Mott que previa a localização dos estados eletrônicos em sistemas unidimensionais desordenados, mesmo quando a desordem é fraca. Em duas dimensões, $g(l)$ decresce muito devagar com o aumento de L , fazendo a curva da função se aproximar muito do eixo $\beta = 0$ para g grande.

Apesar de vários estudos terem comprovado a teoria da localização de Anderson [3], recentemente, alguns trabalhos vêm mostrando que correlações na desordem podem contribuir de forma significativa para a existência de estados estendidos em dimensões iguais ou menores que dois [24, 25, 26, 27, 28]. No capítulo 2 desta dissertação vamos apresentar nossos estudos sobre efeitos de correlações cruzadas em sistemas de cadeias duplas.

MÉTODOS UTILIZADOS

2.1 Construção do Modelo

Nosso modelo consiste de duas cadeias acopladas com N átomos cada uma, conhecida na literatura como cadeia dupla. Um elétron colocado nesta cadeia dupla pode ir de um sítio a outro numa mesma cadeia ou saltar de uma cadeia para o sítio correspondente na outra cadeia. A energia necessária para um elétron pular de um sítio para outro na mesma cadeia é chamada de energia de *hopping* longitudinal e a energia para ele passar de uma cadeia para outra é chamada energia de *hopping* transversal. A energia potencial do elétron em um dado sítio da cadeia dupla é chamada de energia *on site*. Vamos considerar que os sítios de uma determinada cadeia possuem energias *on site* correlacionadas com as energias *on site* dos sítios correspondentes da outra cadeia. Cadeias do DNA apresentam o chamado emparelhamento de bases que é um tipo de correlação cruzada. Em nossos estudos, vamos considerar dois tipos distintos de correlações cruzadas: caso simétrico e antissimétrico. Vamos descrever de forma detalhada cada caso.

Utilizaremos o índice s para nomear cada cadeia, assim, teremos $s = 1$ para a primeira cadeia e $s = 2$ para a segunda. Inicialmente vamos considerar que as energias dos sítios da cadeia $s = 1$ são aleatoriamente escolhidas dentro do intervalo $[-1, 1]$. Para o caso simétrico, consideramos as energias de sítio correspondentes nas duas cadeias como sendo iguais, $(\epsilon_j^{s=1} = \epsilon_j^{s=2})$, e, no caso antissimétrico, as energias dos sítios correspondentes têm mesmo módulo, porém sinais trocados, $(\epsilon_j^{s=1} = -\epsilon_j^{s=2})$. Dentro deste contexto, a proposta de nosso trabalho consiste em investigar o comportamento de uma função de onda neste

tipo de geometria de cadeia dupla e sob os efeitos das correlações cruzadas.

Vamos utilizar o modelo de Anderson, escrito sobre a geometria de cadeia dupla, para investigar a dinâmica eletrônica neste sistema. Como vimos anteriormente, o Hamiltoniano de Anderson em uma dimensão é dado por:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} T_{ij} |i\rangle\langle j| \quad . \quad (2.1)$$

Se considerarmos apenas os primeiros vizinhos, a equação acima pode ser escrita como:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_i [T_{i,i-1} |i\rangle\langle i-1| + T_{i,i+1} |i\rangle\langle i+1|] \quad . \quad (2.2)$$

Como nossa formulação possui duas cadeias lineares acopladas, precisamos fazer algumas modificações no modelo de uma dimensão. Inicialmente, vamos considerar que s representa a linha da cadeia, podendo assumir os valores de 1 ou 2; e c representa a coluna, podendo assumir valores de 1 a j . Desta maneira, nosso sistema pode ser representado por uma matriz com duas linhas e N colunas. Já o Hamiltoniano deverá ter a seguinte forma:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 \epsilon_j^s |j, s\rangle\langle j, s| + \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 V_{\parallel} |j, s\rangle\langle j+1, s| \\ & + \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 V_{\parallel} |j, s\rangle\langle j-1, s| + \sum_{j=1}^N V_{\perp} |j, 1\rangle\langle j, 2| + \sum_{j=1}^N V_{\perp} |j, 2\rangle\langle j, 1| \quad . \quad (2.3) \end{aligned}$$

Ou, de uma forma mais simplificada:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 \epsilon_j^s |j, s\rangle\langle j, s| + \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 V_{\parallel} |j, s\rangle\langle j+1, s| \\ & + \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 V_{\parallel} |j, s\rangle\langle j-1, s| + \sum_{j=1}^N V_{\perp} |j, s\rangle\langle j, \bar{s}| \quad . \quad (2.4) \end{aligned}$$

Na equação acima, \bar{s} é a linha oposta à linha s . Aqui, vamos considerar $s = 1$ e $\bar{s} = 2$. V_{\perp} é a energia de *hopping* de um sítio na linha s para o sítio correspondente na linha \bar{s} e

vice-versa. Logo a matriz do Hamiltoniano será uma matriz $2N \times 2N$ dada por:

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1^1 & V_{\parallel} & 0 & \dots & 0 & V_{\perp} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ V_{\parallel} & \epsilon_2^1 & V_{\parallel} & 0 & \dots & 0 & V_{\perp} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_{\parallel} & \epsilon_3^1 & V_{\parallel} & 0 & \dots & 0 & V_{\perp} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & V_{\parallel} & \epsilon_n^1 & 0 & \dots & 0 & 0 & V_{\perp} \\ V_{\perp} & 0 & \dots & 0 & 0 & \epsilon_1^2 & V_{\parallel} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_{\perp} & 0 & \dots & 0 & V_{\parallel} & \epsilon_2^2 & V_{\parallel} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & V_{\perp} & 0 & \dots & 0 & V_{\parallel} & \epsilon_3^2 & V_{\parallel} & \dots \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & V_{\perp} & 0 & \dots & 0 & V_{\parallel} & \epsilon_n^2 \end{bmatrix} .$$

Como podemos perceber, aqui foram introduzidas duas variáveis: V_{\parallel} e V_{\perp} . Estas variáveis substituirão T , pois elas nada mais são do que as energias de *hopping*, que, aqui, fez-se necessário diferenciar a energia de *hopping* transversal V_{\perp} , quando o salto for realizado de um sítio em uma fita para o sítio respectivo da outra fita, da energia de *hopping* longitudinal V_{\parallel} , quando o salto for realizado de um sítio para o seu vizinho numa mesma fita. Nosso objetivo é observar as propriedades eletrônicas do sistema ao longo do tempo. Devemos então tomar a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{d|\Psi_j^s\rangle}{dt} = H|\Psi_j^s\rangle , \quad (2.5)$$

cuja solução, para o Hamiltoniano independente do tempo, é:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\Psi(t=t_0)\rangle . \quad (2.6)$$

No nosso modelo, escolhemos uma posição inicial para o elétron como sendo um certo

orbital $|j_0, s_0\rangle$. Desta forma, temos a posição inicial:

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^2 C_j^s(t=0) |j, s\rangle \quad , \quad (2.7)$$

com

$$C_j^s(t=0) = \delta_{j,j_0} \delta_{s,s_0} \quad . \quad (2.8)$$

A exponencial dada na equação 2.6 é o operador evolução temporal. Podemos considerar $\hbar = 1$, dizer que $U(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t)$ e, por fim, expandir a exponencial em série de Taylor. Assim, temos que o operador evolução temporal $U(\Delta t)$ pode ficar como:

$$U(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} (-iH\Delta t)^l = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} (-iH\Delta t)^l \quad . \quad (2.9)$$

Aplicando o operador evolução temporal à função de onda inicial, podemos obter a função de onda no tempo Δt . O método pode ser usado recursivamente para se obter a função de onda em qualquer momento t .

$$\begin{aligned} |\Psi_j^s(\Delta t)\rangle &= U(\Delta t) |\Psi_j^s(t=t_0)\rangle \\ &= \left[1 + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} (-iH\Delta t)^l \right] |\Psi(t=t_0)\rangle \\ &= \left[1 + (-iH\Delta t) + \frac{1}{2!} (-iH\Delta t)^2 + \dots \right] |\Psi(t=t_0)\rangle \\ &= [1 + A^1 H + A^2 H^2 + \dots] |\Psi(t=t_0)\rangle \\ &= \left[1 + \sum_l^{\infty} A^l H^l \right] |\Psi(t=t_0)\rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.10)$$

com $A^l = \frac{1}{l!} (-i\Delta t)^l$. Para encontrar $H^l |\Psi(t=t_0)\rangle$, vamos inicialmente definir:

$$H^l |\Psi(t=t_0)\rangle = \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^l |j, s\rangle \quad , \quad (2.11)$$

onde $C_j^s(t)$ é a amplitude de probabilidade do elétron se encontrar no sítio j, s , no instante t .

Para $l = 1$, temos:

$$H^1|\Psi(t = t_0)\rangle = \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^1 |j, s\rangle \quad . \quad (2.12)$$

Aplicando o Hamiltoniano na equação de Schrödinger:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} &= H|\Psi\rangle \\ &= \sum_j^N \sum_s^2 [\epsilon_j^s C_j^s |j, s\rangle \langle j, s|j, s\rangle + V_{\parallel} (C_j^s |j, s\rangle \langle j+1, s|j, s\rangle \\ &\quad + C_j^s |j, s\rangle \langle j-1, s|j, s\rangle) + V_{\perp} C_j^s |j, s\rangle \langle j, \bar{s}|j, s\rangle] \\ &= \sum_j^N \sum_s^2 [\epsilon_j^s C_j^s + V_{\parallel} (C_{j+1}^s + C_{j-1}^s) + V_{\perp} C_j^{\bar{s}}] |j, s\rangle \quad . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Unindo as duas últimas equações, percebemos que:

$$(C_j^s)^1 = \epsilon_j^s C_j^s + V_{\parallel} (C_{j+1}^s + C_{j-1}^s) + V_{\perp} C_j^{\bar{s}} \quad , \quad (2.14)$$

Da mesma forma, quando aplicamos o Hamiltoniano duas vezes, temos:

$$H^2|\Psi(t = t_0)\rangle = HH|\Psi_j^s(t = t_0)\rangle = H \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^1 |j, s\rangle \quad . \quad (2.15)$$

Aplicando novamente o Hamiltoniano na equação acima:

$$\begin{aligned} H \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^1 |j, s\rangle &= \\ &= \sum_j^N \sum_s^2 \{ \epsilon_j^s (C_j^s)^1 |j, s\rangle \langle j, s|j, s\rangle + V_{\parallel} [(C_j^s)^1 |j, s\rangle \langle j+1, s|j, s\rangle + (C_j^s)^1 |j, s\rangle \langle j-1, s|j, s\rangle] \\ &\quad + V_{\perp} (C_j^s)^1 |j, s\rangle \langle j, \bar{s}|j, s\rangle \} \\ &= \sum_j^N \sum_s^2 \{ \epsilon_j^s (C_j^s)^1 + V_{\parallel} [(C_{j+1}^s)^1 + (C_{j-1}^s)^1] + V_{\perp} (C_j^{\bar{s}})^1 \} |j, s\rangle \quad . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Por outro lado, temos a partir da definição 2.11:

$$H^2|\Psi(t = t_0)\rangle = \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^2 |j, s\rangle \quad , \quad (2.17)$$

o que nos permitindo escrever:

$$(C_j^s)^2 = \epsilon_j^s (C_j^s)^1 + V_{\parallel} [(C_{j+1}^s)^1 + (C_{j-1}^s)^1] + V_{\perp} (C_j^{\bar{s}})^1 \quad . \quad (2.18)$$

Aplicando o Hamiltoniano mais uma vez, temos:

$$\begin{aligned} H^3|\Psi(t = t_0)\rangle &= HH^2|\Psi(t = t_0)\rangle = H \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^2 |j, s\rangle = \\ &= \sum_j^N \sum_s^2 \{ \epsilon_j^s (C_j^s)^2 + V_{\parallel} [(C_{j+1}^s)^2 + (C_{j-1}^s)^2] + V_{\perp} (C_j^{\bar{s}})^2 \} |j, s\rangle \quad , \quad (2.19) \end{aligned}$$

uma vez sabendo que:

$$H^3|\Psi(t = t_0)\rangle = \sum_j^N \sum_s^2 (C_j^s)^3 |j, s\rangle \quad , \quad (2.20)$$

temos:

$$(C_j^s)^3 = \epsilon_j^s (C_j^s)^2 + V_{\parallel} [(C_{j+1}^s)^2 + (C_{j-1}^s)^2] + V_{\perp} (C_j^{\bar{s}})^2 \quad , \quad (2.21)$$

o que nos permite escrever a relação de recorrência:

$$(C_j^s)^l = \epsilon_j^s (C_j^s)^{l-1} + V_{\parallel} [(C_{j+1}^s)^{l-1} + (C_{j-1}^s)^{l-1}] + V_{\perp} (C_j^{\bar{s}})^{l-1} \quad , \quad (2.22)$$

e solucionar a evolução temporal dada em 2.10. Nossos resultados foram obtidos com $\Delta t = 0.5$ e o somatório até $l = 20$. Uma vez encontrada a evolução temporal, podemos calcular a raiz quadrada do desvio médio quadrático dado por:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_j \sum_s [(j - j_0)^2 + (s - s_0)^2] |\Psi_j^s(t)|^2} \quad . \quad (2.23)$$

A raiz quadrada do deslocamento médio quadrático σ é uma medida da largura do

pacote de onda ao longo do tempo. Considerando um pacote inicialmente localizado em um único sítio, ou seja $C_j^s = \delta_{j,j_0} \delta_{s,s_0}$, o desvio médio quadrático inicial é nulo. Para tempo longo, σ é uma média da largura final do pacote de onda. Se $\sigma(t \rightarrow \infty)/N$ for independente de N é um indício de que o sistema apresenta estados metálicos. Já se $\sigma(t \rightarrow \infty)/N$ diminui à medida que N cresce, o sistema apresenta estados localizados.

2.2 Método das Matrizes de Transferência

Um método simples que permite ter ideia do espalhamento da função de onda é o método das matrizes de transferência. Além de simples, ele permite calcular o comprimento de localização do pacote de onda sem precisar calcular os autoestados do Hamiltoniano. A precisão numérica do comprimento de localização, λ , pode ser calculada durante todo o processo; enquanto no método da diagonalização numérica, quando é necessário calcular os autoestados, o erro só é estimado após o cálculo e, em geral, são necessárias médias sobre várias amostras para reduzir as flutuações nas quantidades físicas [2].

Partindo da equação de Schrödinger estacionária $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ e da expansão da função de onda nos orbitais l , $|\psi\rangle = \sum_l c_l |l\rangle$, temos, para uma dimensão:

$$E \sum_l c_l |l\rangle = \left[\sum_j \epsilon_j |j\rangle \langle j| + \sum_j (t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| + t_{j-1,j} |j\rangle \langle j-1|) \right] \sum_l c_l |l\rangle \quad . \quad (2.24)$$

E assim:

$$E c_l = \epsilon_l c_l + t_{l-1,l} c_{l-1} + t_{l,l+1} c_{l+1} \quad , \quad (2.25)$$

ou

$$t_{l,l+1} c_{l+1} = (E - \epsilon_l) c_l - t_{l-1,l} c_{l-1} \quad . \quad (2.26)$$

Como podemos ver, podemos escrever o passo seguinte em função dos passos anteriores.

Escrevendo a equação anterior na forma matricial, temos:

$$\begin{pmatrix} c_{l+1} \\ c_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_l)}{t_{l,l+1}} & -\frac{t_{l-1,l}}{t_{l,l+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_l \\ c_{l-1} \end{pmatrix} .$$

Como aqui estamos tratando do caso unidimensional, temos que c_{l-1} , c_l e c_{l+1} são as amplitudes da função de onda nos sítios $l-1$, l e $l+1$, respectivamente, ϵ_l é a energia do sítio l , $t_{l,l+1}$, a energia de *hopping* entre os sítios l e $l+1$ e $t_{l-1,l}$, a energia de *hopping* entre os sítios $l-1$ e l .

A matriz

$$T_l = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_l)}{t_{l,l+1}} & -\frac{t_{l-1,l}}{t_{l,l+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ,$$

é conhecida como matriz de transferência e, se definirmos $C_{l+1} = \begin{pmatrix} c_{l+1} \\ c_l \end{pmatrix}$, e darmos a

condição inicial $C_0 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}$, podemos obter as amplitudes da função de onda nos sítios $N-1$ e N fazendo a multiplicação de todas as matrizes de transferência:

$$C_N = \prod_l^N T_l \times C_0 . \quad (2.27)$$

Uma vez encontradas as amplitudes da função de onda, podemos encontrar o expoente Lyapunov, que é o inverso do comprimento de localização, definido como:

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|C_N|}{|C_0|} . \quad (2.28)$$

No limite termodinâmico, um coeficiente de Lyapunov indo a zero significa uma largura da função de onda muito grande, resultando num estado estendido. Já um coeficiente de Lyapunov finito indica uma largura da função de onda também finita, ou seja, o estado é localizado.

Se tivermos agora um sistema com M fitas, cada uma possuindo N sítios com $N \gg M$, teremos então vetores \vec{c}_l , com $l = 1, 2, 3, \dots, N$, representando as M amplitudes da

função de onda numa linha deste sistema. Teremos, de maneira similar ao caso para uma dimensão, a equação:

$$\mathbf{t}_{l,l+1}\vec{c}_{l+1} = (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_l)\vec{c}_l - \mathbf{t}_{l-1,l}\vec{c}_{l-1} \quad , \quad (2.29)$$

onde $\mathbf{t}_{l,l+1}$ é uma matriz de ordem $M \times M$ cuja diagonal representa os termos de *hopping* entre as linhas l e $l + 1$, \mathbf{H}_l é uma matriz tridiagonal de ordem $M \times M$ representando o Hamiltoniano da l -ésima linha isolada. Analogamente ao caso unidimensional, temos:

$$\begin{pmatrix} \vec{c}_{l+1} \\ \vec{c}_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_l)}{\mathbf{t}_{l,l+1}} & -\frac{\mathbf{t}_{l-1,l}}{\mathbf{t}_{l,l+1}} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{c}_l \\ \vec{c}_{l-1} \end{pmatrix} \quad ,$$

com a matriz de transferência dada por [34, 2]:

$$\mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \frac{(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_l)}{\mathbf{t}_{l,l+1}} & -\frac{\mathbf{t}_{l-1,l}}{\mathbf{t}_{l,l+1}} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Da mesma forma que vimos anteriormente para uma dimensão:

$$\begin{pmatrix} \vec{c}_N \\ \vec{c}_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \mathbf{T}_{N-2} \dots \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_0 \end{pmatrix} = \prod_{n=1}^N \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_0 \end{pmatrix} \quad .$$

Chamando o produto de todas as matrizes de transferência de Q_N , temos que o Teorema de Oseledec [2, 35] prevê a existência de uma matriz limite Γ definida como:

$$\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} (Q_N^\dagger Q_N)^{\frac{1}{2N}} \quad (2.30)$$

Os logaritmos naturais dos autovalores desta matriz Γ são os expoentes de Lyapunov do produto das matrizes de transferência Q_N . O menor expoente de Lyapunov define o comprimento de localização λ [2]. Aparentemente, seria necessário apenas multiplicar todas as matrizes de transferência para N grande, multiplicar o resultado pela sua transposta para encontrar Γ e fazer a diagonalização numérica para encontrar os autovalores. Entretanto, os autovalores de $Q_N^\dagger Q_N$ crescem em diferentes taxas a ponto que os erros

numéricos tornam-se comparáveis ao menor autovalor [2].

Para resolver este problema, ortonormalizamos as colunas da matriz Q_N após um certo número de multiplicações. O intervalo entre as ortonormalizações pode ser ajustado durante o cálculo recursivo e, em geral, varia de 5 a 20 passos de forma a se obter um erro estatístico menor que 5%. Sejam B_i as colunas da matriz Q_N , assim, a ortonormalização é dada por:

$$\bar{B}_i = [B_i - \sum_{j<i} (\bar{B}_j \cdot B_i) \bar{B}_j] / b^{(i)} \quad , \quad (2.31)$$

com

$$b^{(i)} = |B_i - \sum_{j<i} (\bar{B}_j \cdot B_i) \bar{B}_j| \quad . \quad (2.32)$$

Com este método, cada coluna de Q_N é ortonormalizada em relação às outras. No limite de N muito grande, as colunas convergem para autovetores correspondentes aos autovalores em ordem decrescente. Assim, como a matriz Q_N é uma matriz de ordem $2M \times 2M$, a M -ésima coluna é o autovetor relacionado ao menor autovalor de Q_N . A partir do menor autovalor que pode ser calculado recursivamente por:

$$c_n^M = nb_n^M + c_{n-1}^M \quad , \quad (2.33)$$

podemos encontrar o comprimento de localização:

$$\lambda_M = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{c_n^M} \quad . \quad (2.34)$$

Quando N for finito, o comprimento de localização possui um erro estimado dado por:

$$\frac{\Delta \lambda_M}{\lambda_M} = \sqrt{\frac{\mathbf{C}_n^M}{(c_n^M)^2} - \frac{1}{N_0}} \quad , \quad (2.35)$$

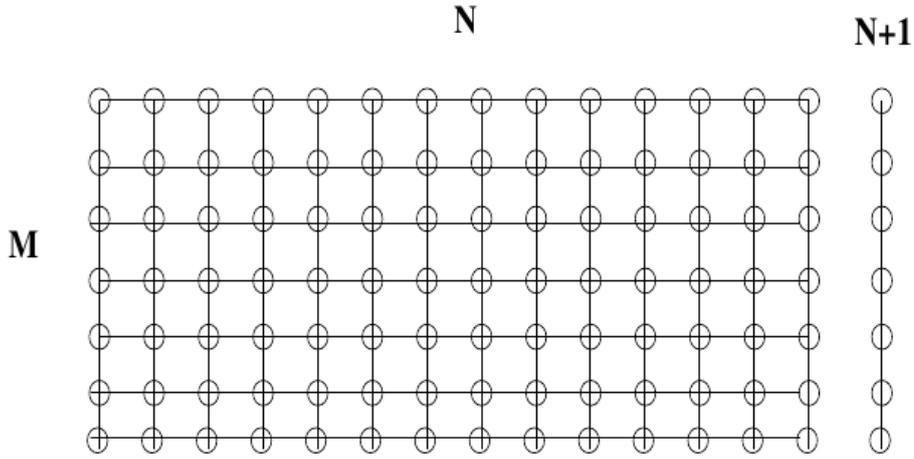
onde N_0 é o número de vezes que a ortonormalização foi aplicada e \mathbf{C}_n^M é calculado usando-se:

$$\mathbf{C}_n^M = (l n b_n^M)^2 + \mathbf{C}_{n-1}^M \quad . \quad (2.36)$$

2.3 Funções de Green

Uma outra maneira de calcular o coeficiente de Lyapunov é pelo método das funções de Green. Uma das vantagens deste método é que ele não exige fazer as ortonormalizações durante o cálculo recursivo como foi feito na seção anterior.

Figura 2.1: Representação de uma cadeia $N \times M$, com $N \gg M$, e a adição de mais uma fatia formando, então, uma cadeia $N + 1 \times M$.



Fonte: F. A. B. F. de Moura, 2003 [2].

Considere um sistema $N \times M$, onde M é a largura da tira e N , seu comprimento, onde $N \gg M$. O esquema pode ser visto na figura 2.1. Seja H^N o Hamiltoniano da tira de dimensões $N \times M$. Se adicionarmos mais uma tira, teremos o Hamiltoniano dado por [2, 3]:

$$H^{N+1} = H^N + V_{N,N+1} + H_{N+1}^0 \quad , \quad (2.37)$$

onde $V_{N,N+1}$ é a matriz dos *hoppings* que acopla a $(N + 1)$ -ésima tira ao sistema anterior com N tiras. O Hamiltoniano H_{N+1}^0 é referente à $(N + 1)$ -ésima tira isolada. A função de Green para o novo sistema, G^{N+1} , é determinada a partir da função de Green para o sistema anterior, G^N , e da função de Green para a tira isolada, G^0 . A matriz de

Green que relaciona a primeira tira com a $(N + 1)$ -ésima tira é calculada pelas seguintes equações [2, 3]:

$$G_{1,N+1}^{(N+1)} = G_{1,N}^N V_{N,N+1} G_{N+1,N+1}^N \quad , \quad (2.38)$$

$$G_{N+1,N+1}^{(N+1)} = (\mathbf{E}\mathbf{I} - H_{N+1,N+1}^0 - V_{N,N+1} G_{N,N}^N V_{N,N+1}^\dagger)^{-1} \quad , \quad (2.39)$$

$$G_{1,1}^1 = \mathbf{I} \quad , \quad (2.40)$$

$$G_{0,0}^0 = 0 \quad . \quad (2.41)$$

Encontramos o coeficiente de Lyapunov $\gamma_M(E)$ para uma tira $N \times M$ por meio de $G_{1,N}^N$ da seguinte maneira:

$$\gamma_M(E) = -\frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln [Tr |G_{1,N+1}^{N+1}|^2] \quad (2.42)$$

A dificuldade deste método está em fazer as inversões das matrizes a cada interação.

2.4 Densidade de Estados

A densidade de estados do modelo pode ser calculada através da diagonalização numérica da representação matricial do Hamiltoniano (ver subsecção 2.1). O processo de diagonalização do Hamiltoniano será feito utilizando a biblioteca LAPACK. A densidade de estados formalmente é definida por $DOS(E) = \sum_{E_j} \delta(E - E_j)$ onde E_j são as autoenergias do Hamiltoniano obtidas através da diagonalização exata. Na prática, o cálculo numérico da densidade de estados é feito através da aproximação $\delta(E - E_j) \approx 1/\Delta E$ com $\Delta = 0.05$ ou menor. Basicamente o procedimento consiste de um histograma das autoenergias.

RESULTADOS

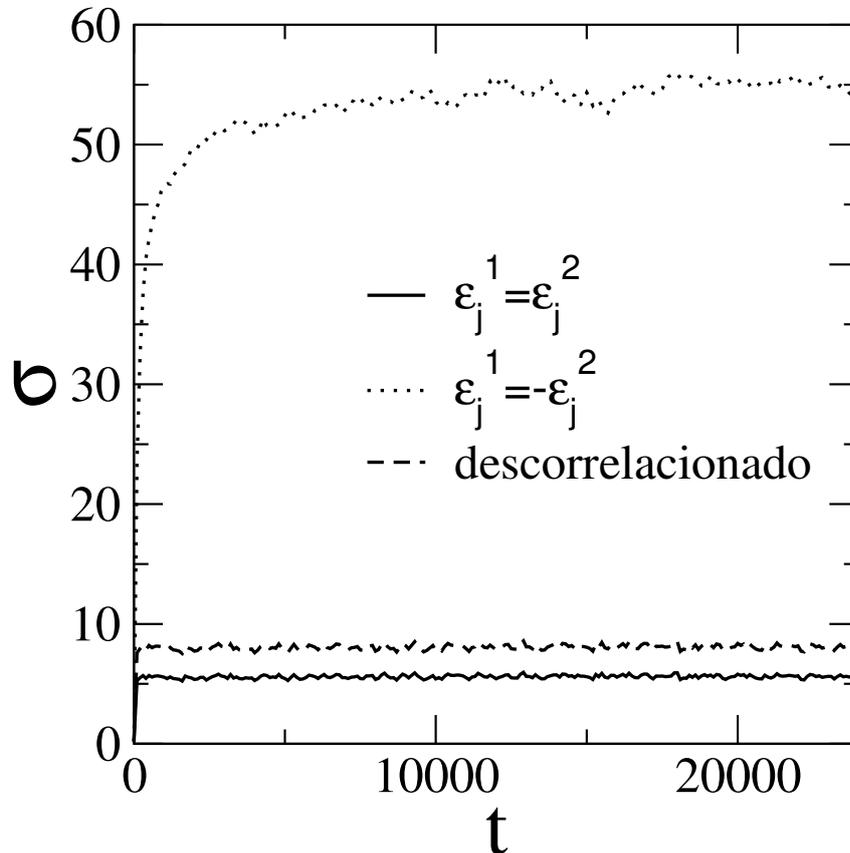
Nossos resultados foram obtidos por meio da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo para cadeias duplas de tamanhos variando de 1000 a 16000 sítios em cada fita. A cada passo, calculamos a densidade de probabilidade do pacote de onda de maneira que $|1 - \sum_{js} |\Psi_j^s(t)|^2| < 10^{-10}$ para garantir a convergência numérica dos resultados. Todas as médias foram tiradas com mais de 30 configurações de desordem, as quais foram suficientes para manter as flutuações estatísticas muito menores que o valor médio de todas as quantidades físicas estudadas.

Nosso primeiro resultado (fig. 3.1) é o desvio médio quadrático do pacote de onda em função do tempo e foi retirado a partir de uma cadeia com 4000 sítios em cada linha. Consideramos os dois tipos de correlações cruzadas: a correlação simétrica ($\epsilon_j^{s=1} = \epsilon_j^{s=2}$) e a correlação antissimétrica ($\epsilon_j^{s=1} = -\epsilon_j^{s=2}$). Comparamos nossos cálculos com uma cadeia dupla com desordem descorrelacionada. O módulo das energias usadas tanto para o *hopping* transversal V_{\perp} quanto para o *hopping* longitudinal V_{\parallel} foi igual a 1.

Como podemos ver, o pacote de onda é mais espalhado para o caso antissimétrico do que para os outros dois casos. Quando as energias dos sítios correspondentes nas duas linhas possuem o mesmo valor, o pacote de onda se comporta de maneira muito semelhante a uma cadeia dupla com desordem não correlacionada.

No segundo e terceiro resultados (fig. 3.2 e fig. 3.3, respectivamente), reescalamos o desvio médio quadrático do pacote de onda e o tempo, dividindo-os pelo tamanho da cadeia N . Foram tomadas cadeias de tamanhos de 1000 a 16000 sítios e os valores tomados para as energias de *hopping* V_{\perp} e V_{\parallel} foram iguais a 1. Pudemos, com estes resultados, ter uma ideia da proporção entre o espalhamento do pacote de onda e o tamanho da cadeia.

Figura 3.1: Desvio médio quadrático do pacote de onda σ em função do tempo t . A localização é mais fraca para o caso antissimétrico, quando o pacote de onda se espalha por 50 a 60 sítios. Para o caso simétrico, temos um espalhamento da função de onda por menos de 10 sítios, resultado muito próximo do caso sem correlação.

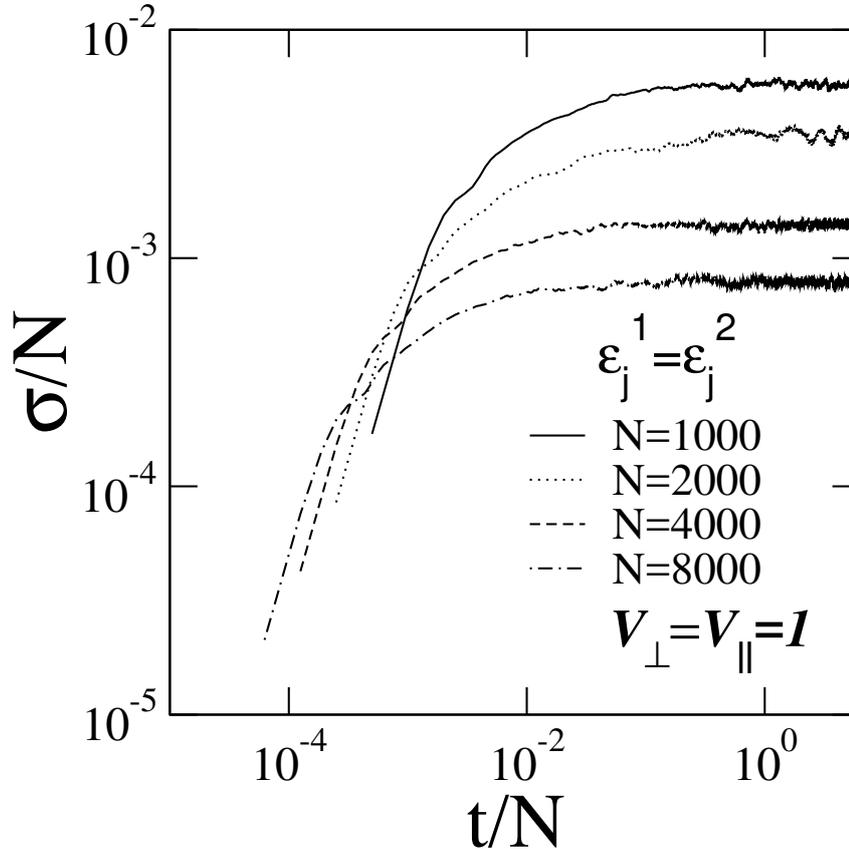


Fonte: Autora, 2012.

O comportamento esperado para estados estendidos num tempo muito grande é que todas as curvas colapsem em uma única curva, pois significa que o elétron consegue se locomover por toda a extensão do material num tempo longo e $\sigma \propto t$.

Como podemos ver nas figuras 3.2 e 3.3, os desvios médios quadráticos reescalados decrescem à medida que as amostras aumentam de tamanho. Isto indica que o elétron consegue se locomover apenas por uma pequena região do espaço e, quando dividido o comprimento do pacote de onda pelo número de sítios, esta razão diminui à medida que o tamanho da amostra aumenta. Como foi dito anteriormente, para haver transporte eletrônico, seria necessário que, para um tempo muito grande, todas as curvas colapsassem em uma única curva independente do tamanho das cadeias. Desta forma, podemos ver, por meio das duas figuras, que não existem estados realmente estendidos no limite

Figura 3.2: Comprimento do pacote de onda dependente do tempo reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N para correlação cruzada simétrica

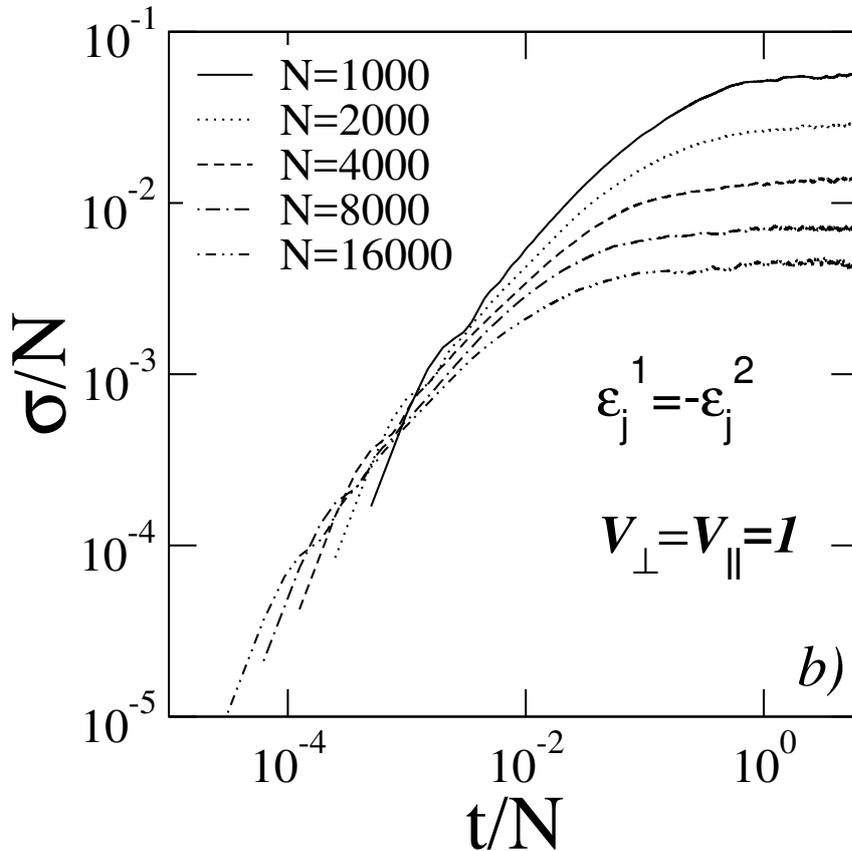


Fonte: Autora, 2012.

termodinâmico mesmo para o caso das correlações cruzadas antissimétricas. Este fato está de acordo com o que já havia sido obtido anteriormente [30, 31, 32] de que apenas a correlação cruzada não seria suficiente para levar a uma transição metal-isolante num modelo desordenado de dois canais.

Por outro lado, se fizermos uma comparação entre os resultados obtidos para correlações simétrica e antissimétrica nas figuras 3.2 e 3.3, vemos que, para a correlação antissimétrica, o desvio médio quadrático do pacote de onda reescalado satura em cerca de uma ordem de grandeza a mais do que para o caso da correlação simétrica. O caso da correlação antissimétrica é semelhante ao caso estudado por Caetano e Schulz em [29] no qual o DNA sintético também possuía a característica $\epsilon_j^{+1} + \epsilon_j^{-1} = 0$ e pensou-se haver uma transição metal-isolante. Diante desta questão importante, fizemos um estudo mais detalhado desta situação.

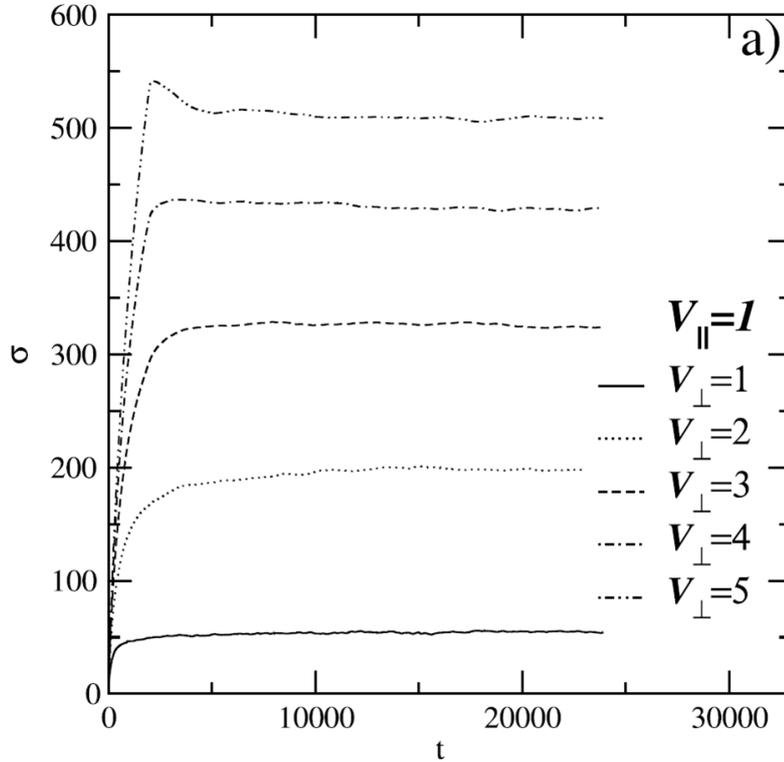
Figura 3.3: Comprimento do pacote de onda dependente do tempo reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N para correlação cruzada antissimétrica



Fonte: Autora, 2012.

Vamos analisar do ponto de vista analítico o efeito das correlações cruzadas no transporte eletrônico no modelo de cadeia dupla. Inicialmente vamos considerar o caso com correlações cruzadas simétricas na distribuição de desordem. Vamos considerar o Hamiltoniano de um de um dímero $(\epsilon_j^{+1}, \epsilon_j^{-1})$. Lembrando que, no caso de correlações cruzadas simétricas $\epsilon_j^{+1} = \epsilon_j^{-1}$, os dímeros isolados possuem autoenergias dadas por $\lambda_1 = \epsilon_j - V_{\perp}$ e $\lambda_2 = \epsilon_j + V_{\perp}$. No regime de forte acoplamento entre as cadeias, estes dois modos não podem ser misturados pelo acoplamento entre o par. Logo, como nossa cadeia dupla consiste de uma sequência de dímeros deste tipo, o modelo de dois canais com correlações cruzadas simétricas deve se comportar como duas cadeias aleatórias desacopladas com energias *on site* dadas por $\pm V_{\perp}$. Portanto, o sistema apresenta desordem macroscópica com largura fixa. Dentro deste cenário, a cadeia dupla com correlações simétricas deve apresentar propriedades de localização semelhante às propriedades encontradas em

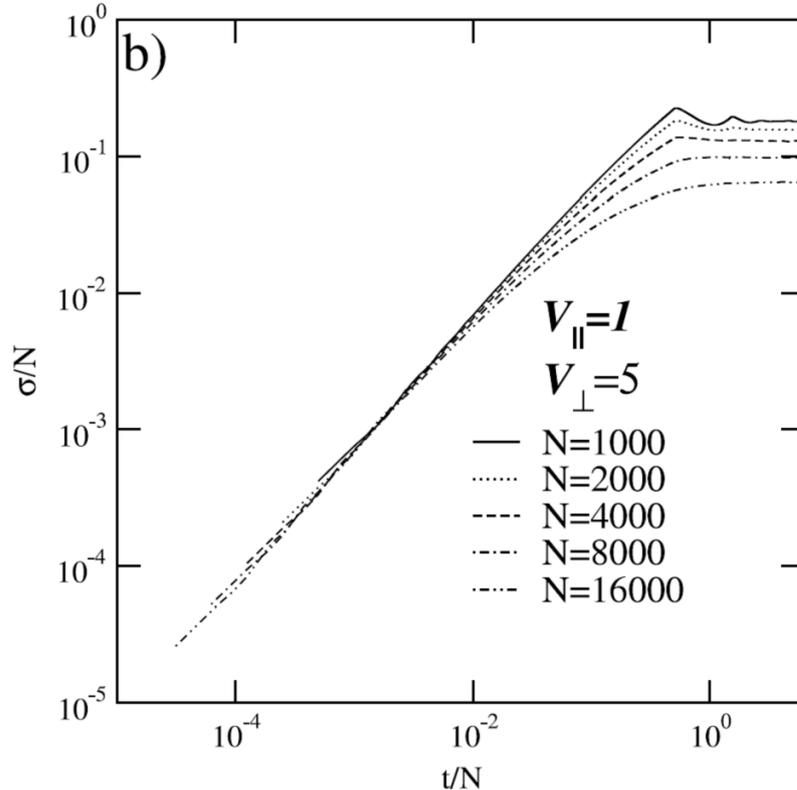
Figura 3.4: Largura σ do pacote de onda em função do tempo mantendo a energia de sítio igual a 1 e variando a energia de *hopping* de 1 a 5. À medida que o acoplamento entre as cadeias fica mais forte, mais fraca é a localização.



Fonte: Autora, 2012.

cadeias duplas com desordem não correlacionada. Esta análise é totalmente compatível com os resultados da figura 3.2. Por outro lado, uma análise mais detalhada do caso de correlações cruzadas antissimétricas revela resultados diferentes. Lembrando que, neste caso $\epsilon_j^{+1} = -\epsilon_j^{-1}$, o Hamiltoniano de um dímero isolado possui autoenergias dadas por $\lambda_1 = \sqrt{\epsilon_j^2 + V_{\perp}^2}$ e $\lambda_2 = -\sqrt{\epsilon_j^2 + V_{\perp}^2}$. No regime de forte acoplamento entre as cadeias, estas autoenergias podem ser escritas como $\pm V_{\perp} \pm \epsilon_j^2/2V_{\perp}$. Novamente, estes modos não são efetivamente misturados pelo acoplamento entre as cadeias e o sistema deve se comportar como duas cadeias aleatórias independentes. Entretanto, observe que a desordem efetiva é reescalada pelo termo $1/V_{\perp}$. Portanto, para forte acoplamento entre as cadeias, o modelo de cadeia dupla com correlações cruzadas antissimétricas apresenta uma desordem efetiva fraca. O enfraquecimento da desordem efetiva pela presença de correlações cruzadas antissimétricas favorece a propagação eletrônica, como observamos numericamente no estudo da evolução temporal de um pacote inicialmente localizado (figura 3.3).

Figura 3.5: Comprimento do pacote de onda reescalado σ/N em função do tempo reescalado t/N para cadeias com 1000 a 16000 sítios com $V_{\parallel} = 1$ e V_{\perp} variando de 1 a 5. Como σ/N diminui à medida que N aumenta, fica clara a localização do pacote de onda.



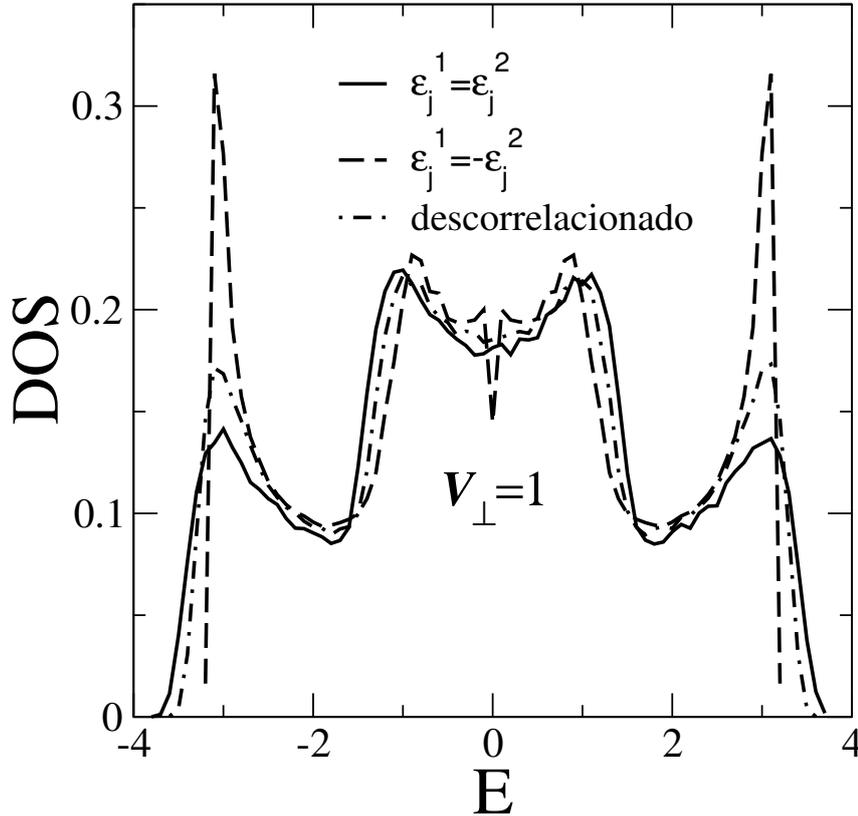
Fonte: Autora, 2012.

Entretanto, temos que salientar que este tipo de correlação cruzada não é suficiente para promover o aparecimento de estados estendidos.

Vamos apresentar agora uma análise mais detalhada das propriedades de localização da cadeia dupla com correlações cruzadas e a dependência com o acoplamento entre as cadeias V_{\perp} . Vamos examinar o comportamento da função de onda dependente do tempo quando aumentamos o acoplamento entre as cadeias, ou seja, quando o valor de V_{\perp} aumenta.

Na figura 3.4, temos a largura do pacote de onda σ em função do tempo para valores da energia de *hopping* V_{\perp} variando de 1 a 5 para a correlação cruzada antissimétrica. O valor da energia de hopping V_{\parallel} foi mantido constante igual a 1. O tamanho da cadeia foi de 4000 sítios. Percebemos que, para $V_{\perp} = 1$, a largura σ do pacote de onda satura em torno de 50 sítios e cresce à medida que aumentamos o valor da energia de *hopping*

Figura 3.6: Densidade de estados $DOS(E)$ versus energia E para cadeias duplas com energias de *hopping* $V_{\perp} = V_{\parallel} = 1$. Consideramos correlações cruzadas simétricas, antissimétricas e também o caso descorrelacionado. Diagonalização numérica do Hamiltoniano com $N = 5000$. Utilizamos 500 amostras para fazer médias e diminuir a flutuação. Nossos resultados indicam que, independente do tipo de correlação utilizada, a densidade de estados apresenta um perfil típico de cadeia dupla desordenada.

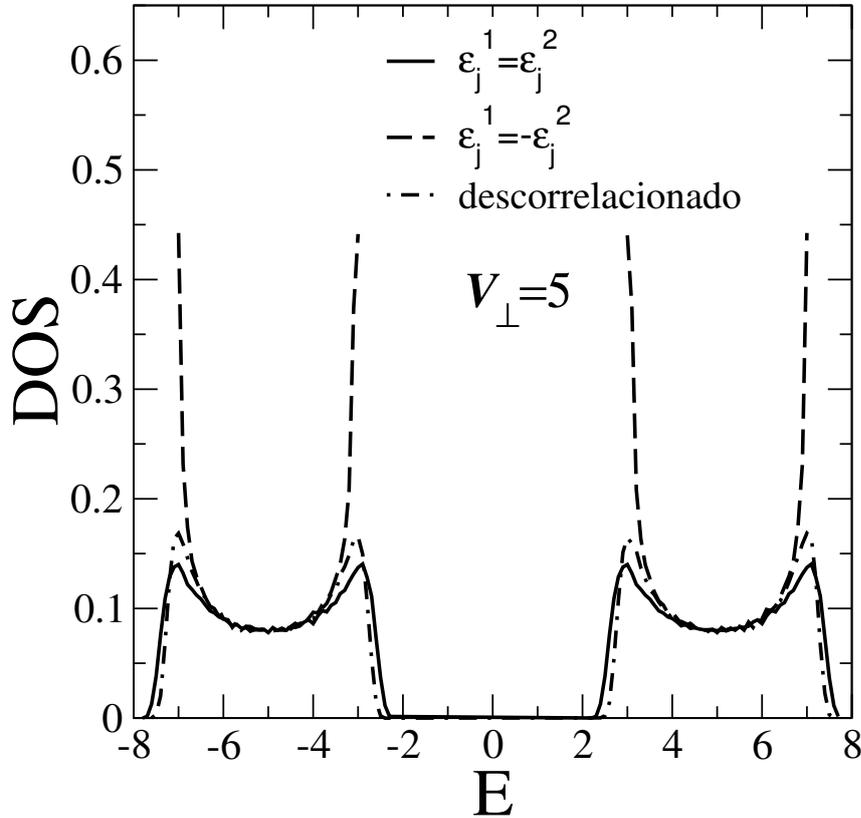


Fonte: Autora, 2012.

transversal V_{\perp} , chegando a mais de 500 sítios para $V_{\perp} = 5$. Conforme já esperávamos, o grau de localização do pacote de onda diminui quando aumentamos o acoplamento entre as cadeias. Observe, entretanto, que este aumento na largura do pacote de onda não indica uma transição metal-isolante. Podemos observar isso fazendo uma análise de escala do desvio médio quadrático σ do pacote.

Consideramos os mesmos valores das energias V_{\perp} e V_{\parallel} e reescalamos a largura σ e o tempo pelo número de sítios N . O tamanho da amostra variou de 1000 a 16000 sítios. O resultado pode ser visto na figura 3.5. Como podemos ver, a razão σ/N diminui com o aumento de N . Nossos resultados numéricos sugerem que $\sigma/N \rightarrow 0$, mesmo para o regime de forte acoplamento entre as cadeias, ou seja, estados localizados no limite termodinâmico.

Figura 3.7: Densidade de estados $DOS(E)$ versus energia E para cadeias duplas com energias de *hopping* $V_{\parallel} = 1$ e $V_{\perp} = 5$. Podemos observar claramente que a cadeia dupla com correlações cruzadas antissimétricas apresenta uma densidade de estados suave, semelhante a duas cadeias puras desacopladas com energias $+V_{\perp}$ e $-V_{\perp}$.

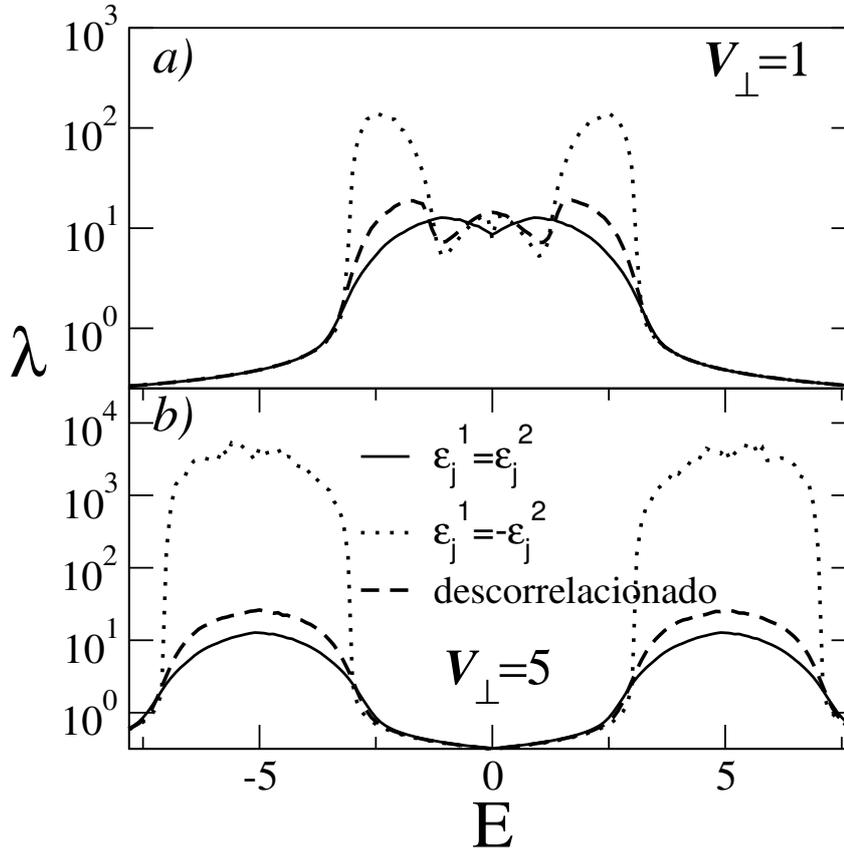


Fonte: Autora, 2012.

mico. Logo, como previmos de forma analítica, no limite de forte acoplamento entre as cadeias, as correlações cruzadas antissimétricas induzem uma considerável redução do grau de localização, entretanto, não existem estados realmente estendidos no sistema.

Na figura 3.6, apresentamos nossos resultados para a densidade de estados $DOS(E)$ versus energia E para cadeias duplas com correlações cruzadas simétrica e antissimétrica e para uma cadeia dupla com distribuição de desordem não correlacionada. Os valores para as energias de *hopping* V_{\perp} e V_{\parallel} foram iguais a 1. O cálculo numérico foi feito diagonalizando o Hamiltoniano usando $N = 5000$. Utilizamos 500 amostras para fazer médias e diminuir a flutuação. Nossos resultados para a densidade de estados são coerentes com os resultados da dinâmica eletrônica e a abordagem analítica. Independente do tipo de correlação utilizada, a densidade de estados apresenta um perfil típico de cadeia dupla desordenada.

Figura 3.8: a) Comprimento de localização para cadeias duplas com $N = 10^7$ e considerando correlações cruzadas simétrica, antissimétrica e o caso com desordem não correlacionada. Resultados obtidos para $V_{\perp} = V_{\parallel} = 1$. b) Mesmo cálculo efetuado no caso (a) sendo que com $V_{\parallel} = 1$ e $V_{\perp} = 5$. Observe que o caso com correlação antissimétrica tem em geral um comprimento de localização maior do que os demais casos. Para forte acoplamento entre as cadeias, este resultado fica ainda mais pronunciado.

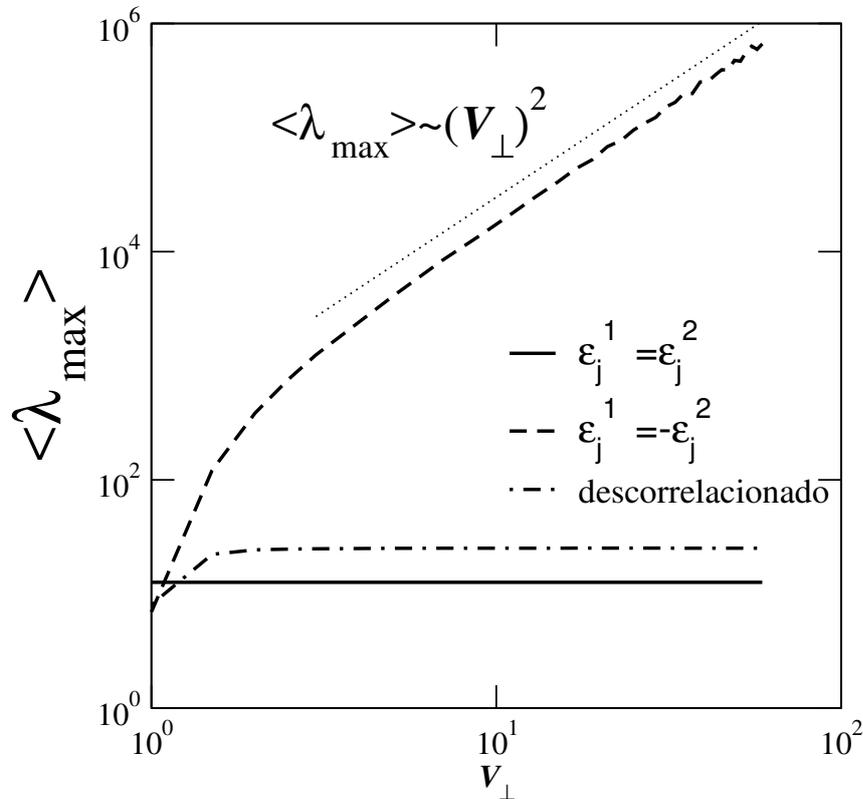


Fonte: Autora, 2012.

Na figura 3.7, apresentamos resultados semelhantes aos apresentados na figura 3.6, sendo agora com energia de *hopping* $V_{\perp} = 5$. Podemos observar claramente que, neste caso de forte acoplamento entre as cadeias, o sistema com correlação cruzada antissimétrica apresenta uma densidade de estados suave, semelhante a duas cadeias puras desacopladas com energias $+V_{\perp}$ e $-V_{\perp}$. Este resultado também é totalmente compatível com os resultados anteriores numéricos e a previsão analítica de desordem fraca quando V_{\perp} é aumentado.

Agora vamos apresentar nossos resultados do comprimento de localização. Na figura 3.8, calculamos o comprimento de localização utilizando cadeias duplas com $N = 10^7$, onde foram consideradas correlações cruzadas simétrica e antissimétrica, assim como o

Figura 3.9: Maior comprimento de localização Λ_{max} para os diversos tipos de cadeias duplas consideradas neste trabalho em função do acoplamento entre as cadeias V_{\perp} . Nossos resultados numéricos sugerem que $\Lambda_{max} \propto (V_{\perp})^2$.



Fonte: Autora, 2012.

caso com desordem não correlacionada. Na figura 3.8a, temos os resultados com $V_{\perp} = V_{\parallel} = 1$. Observe que o caso com correlação antissimétrica tem em geral um comprimento de localização maior do que os demais casos. Para forte acoplamento entre as cadeias, este resultado fica ainda mais pronunciado. Na figura 3.8b, analisamos o caso com $V_{\parallel} = 1$ e $V_{\perp} = 5$. Podemos observar claramente que o comprimento de localização do caso com correlação antissimétrica excede os demais em quase três ordens de grandeza.

Na figura 3.9, analisamos como o maior comprimento de localização λ_{max} destas cadeias duplas cresce com o acoplamento entre as cadeias V_{\perp} . Nossos resultados numéricos sugerem que $\lambda_{max} \propto (V_{\perp})^2$. Vamos tentar entender este resultado seguindo a abordagem analítica do problema da cadeia dupla com correlações antissimétricas. Mostramos que, à medida que o acoplamento V_{\perp} diverge, a desordem efetiva na cadeia tende a zero da forma $1/V_{\perp}$. Vamos lembrar que, em sistemas unidimensionais desordenados, o comprimento de localização é inversamente proporcional ao quadrado da largura

da desordem. Desta forma, considerando que nossa cadeia dupla é um sistema basicamente unidimensional, podemos mostrar que o comprimento de localização diverge com $\lambda_{max} \propto 1/W^2 = (V_{\perp})^2$. Este resultado está em plena concordância com nossa análise numérica apresentada na figura 3.9.

CONCLUSÃO

Neste trabalho de mestrado, estudamos detalhadamente a dinâmica eletrônica em cadeias duplas com correlações cruzadas na distribuição de desordem. Diversos sistemas de interesse atual apresentam uma geometria quasiunidimensional composto por duas cadeias desordenadas acopladas. Um exemplo típico são as cadeias do DNA. O DNA é basicamente uma cadeia dupla que apresenta uma sequência aleatória de bases emparelhadas. O emparelhamento $G - C(C - G)$ ou $A - T(T - A)$ é um tipo de correlação cruzada encontrada em sistemas reais. Em nosso estudo, consideramos modelos de cadeias duplas com correlações cruzadas simétrica e antissimétrica. No caso simétrico, as energias *on site* das duas cadeias são idênticas ($\epsilon_j^{s=1} = \epsilon_j^{s=2}$) enquanto que, no caso antissimétrico, as energias possuem o mesmo módulo, porém com sinais trocados ($\epsilon_j^{s=1} = -\epsilon_j^{s=2}$). Estudamos a dinâmica eletrônica neste tipo de geometria usando o formalismo proposto por Anderson. Dentro desta abordagem, utilizamos diversas técnicas numéricas: solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, diagonalização exata do Hamiltoniano, métodos de funções de Green e o método da matriz de transferência. Em todas as abordagens utilizadas, nossos resultados indicam que as correlações cruzadas do tipo antissimétricas desempenham um papel importante no transporte eletrônico. Especialmente quando o acoplamento entre as cadeias é forte, o comprimento de localização cresce diversas ordens de grandeza se comparado com o caso com correlações cruzadas simétricas. Fizemos uma análise numérica e analítica criteriosa do modelo e mostramos que este tipo de correlação induz uma diminuição da largura de desordem do modelo. Outro aspecto importante de nosso trabalho foi mostrar que, apesar do crescimento do comprimento de localização em sistemas com correlações cruzadas, este tipo de modelo não apresenta transição

metal-isolante. De fato, o aumento do comprimento de localização pode ser importante no transporte eletrônico em sistemas finitos, entretanto, no limite termodinâmico, não existem estados metálicos. Os principais resultados deste trabalho foram publicados na revista *Journal of Physics: Condensed Matter* [36]

Uma perspectiva de nosso trabalho seria o estudo do efeito de campos externos, assim como não considerar a presença de mais cadeias acopladas com estes modelos de correlações cruzadas, algo semelhante ao que existe no DNA, a presença de uma cadeia de açúcar-fósforo.

REFERÊNCIAS

- [1] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Winston, Philadelphia 1976).
- [2] F. A. B. F. de Moura, *Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada* Tese - UFPE, Recife, 2003.
- [3] B. Kramer e A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469, 1993.
- [4] D. H. Dunlap, H. L. Wu e P. W. Phillips, PW Phys. Rev. Lett. **65**, 88, 1990.
- [5] <http://www.molecularstation.com/images/chemical-structure-dna.gif>
- [6] R. G. Endres, D. L. Cox e R. R. P. Singh, Reviews of Modern Physics, **76**, 195, 2004.
- [7] D. D. Eley e D. I. Spivey, Trans. Faraday Soc. **58**, 411, 1962.
- [8] P. Carpena, P. Bernaola-Galván, P. Ch. Ivanov e H. E. Stanley, Nature (London) **418**, 955, 2002.
- [9] E. Braun, Y. Eichen, U. Sivan e G. Ben-Yoseph, Nature (London) **391**, 775, 1998.
- [10] P. J. de Pablo, F. Moreno-Herrero, J. Colchero, J. Gómez Herrero, P. Herrero, A. M.Bar, P. Ordejón, J. M. Soler e E. Artacho, Phys. Rev. Lett. **85**, 4992, 2000.
- [11] A. J. Storm, J. Van Noort, S. De Vries e C. Dekker, Appl. Phys. Lett. **79**, 3881, 2001.
- [12] L. Cai, H. Tabata e T. Kawai, Nanotechn. **12**, 211, 2001.
- [13] Y. Zhang, R. H. Austin, J. Kraeft, E. C. Cox e N. P. Ong, 2002, Phys. Rev. Lett. **89**, 198102.
- [14] Porath, D., A. Bezryadin, S. De Vries e C. Decker, Nature (London) **403**,635, 2000.

-
- [15] A. Rakitin, P. Aich, C. Papadopoulos, Y. Kobzar, A. S. Vedeneev, J. S. Lee e J.M. Xu, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3670, 2001.
- [16] H. W. Fink e C. Schönenberger, *Nature (London)* **398**, 407, 1999.
- [17] A. Y. Kasumov, M. Kociak, S. Gueron, B. Reulet e V. T. Volkov, *Science* **291**, 280, 2001.
- [18] A. D. Chepelianskii, D. Klinov, A. Kasumov, S. Gueron, O. Pietrement, S. Lyonnais e H. Bouchiat, *New J. Phys.* **13**, 2011.
- [19] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Virginia Tech Blacksburg, Virginia, 1998).
- [20] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th Edition, 2005.
- [21] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492, 1958.
- [22] T. Heikkilä *Anderson Metal-insulator Transition* (Helsinki University of Technology, 1998).
- [23] E. Abrahams, P. W. Anderson, D.C. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673, 1979.
- [24] F. A. B. F. de Moura e M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735, 1998.
- [25] Y. Asada, K. Slevin e T. Ohtsuki, *Phys. Rev. B* **70**, 035115, 2008.
- [26] Y. Asada, K. Slevin, T. Ohtsuki, *Physica E*, **13**, 274, 2003.
- [27] Y. Asada, K. Slevin, T. Ohtsuki, *Physica E*, **34**, 228, 2006.
- [28] A. Djeraba, K. Senouci e N. Zekri, *Physica B* **405**, 1558, 2010.
- [29] R. A. Caetano e P. A. Schulz, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 126601, 2005.
- [30] A. Sedrakyan e F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 059703, 2006.

-
- [31] E. Díaz, A. Sedrakyan, D. Sedrakyan e F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* **75**, 014201, 2007.
- [32] V. M. K. Bagci e A. A. Krokhin, *Phys. Rev. B* **76**, 134202, 2007.
- [33] D. J. Thouless, *Physics Reports* **13**, 93, 1974.
- [34] B. Kramer, A. MacKinnon, T. Ohtsuki e K. Slevin, *International J. of Modern Phys. B*, **24**, 1841, 2010.
- [35] <http://math.ucr.edu/~kelliher/Geometry/LectureNotes.pdf>
- [36] R. C. P. Carvalho, M. L. Lyra, F. A. B. F. de Moura e F. Dominguez-Adame, *J. Phys.: Condensed Matter* **23**, 175304, 2011.