

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

THAÍLA FIGUEIREDO ASSUNÇÃO

DINÂMICA ELETRÔNICA E ESPECTRO DE ABSORÇÃO EM  
SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS COM DESORDEM  
CORRELACIONADA

Maceió  
2011

THAÍLA FIGUEIREDO ASSUNÇÃO

DINÂMICA ELETRÔNICA E ESPECTRO DE ABSORÇÃO EM  
SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS COM DESORDÊM  
CORRELACIONADA

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

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

Maceió  
2011

*Aos meus pais João e Maria,  
por todo o amor e incentivo.*

## AGRADECIMENTOS

Esse trabalho marca mais do que o fim de uma etapa ou a conquista de um título, trata-se de um divisor de água em minha vida. Foram muitos os obstáculos e a maioria deles não vieram de fora, estavam em mim. A minha insegurança, os meus medos, os meus limites foram coisas com as quais tive que aprender a lidar. Mas eu consegui, e se hoje estou aqui é porque tive ao meu lado pessoas muito especiais, que me acolheram e torceram por mim. Gostaria de deixar registrado o meus sinceros agradecimentos:

À Deus pela paz interior e sabedoria para enfrentar as turbulências;

Aos meus pais João e Maria, a quem dedico tudo o que sou, sofreram comigo cada página desse trabalho, mas não permitiram que eu desanimasse;

À minha irmã Fabiana, à minha sobrinha Indira e ao meu irmão Rafael pela confiança e carinho;

Ao meu namorado Diorge por aceitar a longa jornada de ausência. Apesar das dificuldades sei que sempre esteve comigo;

À todos os meus familiares, tias (os), primas(os), meus avós, por torcerem por mim;

Ao meu orientador Professor Fidelis, pela amizade, pela paciência, pelo apoio e por todos os ensinamentos, não somente em física, mas pelas sábias lições de vida. “Mais do que aprender a bater é preciso aprender a apanhar” (levarei isso comigo). Sem dúvida, é um exemplo de profissional, mais do que isso, uma referência de pessoa, de uma generosidade e simplicidade ímpar.

Ao Professor Marcelo Leite Lyra pela colaboração e incentivo imprescindíveis para a realização deste trabalho.

A todos os meus amigos (e não são poucos), em especial aos do IF, com quem dividir a

maioria dos meus dias nos últimos dois anos, em especial a Carlos, Cícero Julião, Wandearley, Socorro, Felipe, Rafael, Alex, Geovana, Samuel, Queila, Daniela e Ana Paula, amigos que me fizeram sorrir, escutaram as minhas tristezas, preencheram um pouquinho da minha solidão e socorreram-me nas dificuldades;

Aos professores do IF, em especial aos Professores Elton Malta e Rodrigo Lima pelas incontáveis ajudas que possibilitaram o desenvolvimento do meu trabalho. E ao Professor Ítalo Nunes pela amizade;

Aos demais funcionários do IF que sempre me trataram com muito carinho;

À três grandes amigas, Luciana, Whinnie e Lucelia, que apesar da distância sempre se fizeram presentes;

À Professora Cristina, minha orientadora na graduação, foi dela o incentivo para fazer o mestrado;

À Dona Zoraide que muito me ajudou durante esses dois anos, pela atenção, pelo cuidado, pelos aulas de culinária e claro, pelos lanchinhos;

À Capes e à Fapeal pelo apoio financeiro.

*Não existe triunfo sem perda,  
não há vitória sem sofrimento,  
não há liberdade sem sacrifício.*

Senhor dos Anéis  
- O Retorno do Rei -

## RESUMO

Da teoria de potenciais periódicos é sabido que a função de onda do elétron é estendida por todo o sistema. No entanto, a presença de desordem na rede pode provocar mudanças no comportamento do pacote de onda, como foi mostrado por Anderson em sua teoria de localização. Para sistema desordenado unidimensional essa teoria diz que o pacote de onda eletrônico é localizado independente da quantidade de desordem, porém a existência de correlação de longo alcance na desordem pode gerar estados delocalizados mesmo em sistemas unidimensionais. Portanto, neste trabalho estudamos um modelo de Anderson unidimensional desordenado com correlação de longo alcance fora da diagonal. A correlação de longo alcance foi introduzida no sistema escrevendo a energia de hopping como sendo o traço do movimento browniano fracionário, com densidade espectral tipo lei de potência  $S(k) \propto 1/k$ . Por meio de um modelo *tight-binding* revisitamos, através do cálculo da participação média e da flutuação relativa da participação, a existência de estados estendidos no centro da banda para forte grau de correlação  $\alpha > 2$  e ainda mostramos que o expoente crítico  $\alpha = 2$ , no qual ocorre a transição de Anderson (delocalizado-localizado), não depende da quantidade de desordem. Apresentamos também, a possibilidade de estudar esse tipo de transição através do cálculo da absorção óptica. Para o mesmo modelo, mostramos que a medida que aumentamos a correlação da desordem, o pico da absorção alarga até um ponto  $\alpha > 2$  onde a absorção óptica passa a exibir um pico duplo, caracterizando portanto, uma transição de Anderson. Além disso, apresentamos o estudo da dinâmica de um pacote de onda, inicialmente localizado, sob a ação do campo elétrico e mostramos por meio do cálculo da posição média que quando a correlação da desordem é forte  $\alpha > 2$  o pacote de onda apresenta um movimento oscilatório, o qual está associado a estados estendidos e cuja frequência de oscilação mostramos ser igual ao valor do campo aplicado, o que caracteriza o fenômeno de oscilações de Bloch, típico de sistemas estendidos. Confirmando assim, que sistema desordenado unidimensional pode apresentar transição de Anderson.

**Palavras-chave:** Desordem correlacionada. Espectro absorção. Oscilações de Bloch.

# ABSTRACT

In this work we study an one-dimensional Anderson model with long-range correlated off-diagonal disorder. We calculate the average participation number and its scaling behavior through direct diagonalization. The scaling analysis of the relative fluctuations on the mean participation number around the band center indicates the presence of extended states for high degree of correlation and reveals that the critical spectral exponent does not depend of the disorder strength. We also numerically demonstrated that the delocalization-localization transition reveal itself in the optical absorption. The emergence of delocalized states is signaled by the development of a well-defined doublet. In addition, the numerical calculations of the electric field biased dynamics of an initially localized wave packet have shown that, associated with extended states, sustainable Bloch-like oscillations sets up with the frequency obeying a semi-classical prediction.

**Keywords:** Correlated disorder. Bloch-like oscillations. Absorption spectra.

# LISTA DE FIGURAS

2.1	Esquema de um potencial periódico típico. . . . .	16
2.2	Esquema reduzido de energia do elétron dentro da primeira zona de Brillouin. Para um mesmo valor de $\mathbf{k}$ é possível obter diferentes valores de energias. . . . .	17
2.3	(a) Energia versus número de onda para um elétron livre. (b) Energia versus número de onda para uma rede de potencial periódico. A banda proibida está associada à reflexão de Bragg, que acontece para $k = \pm\pi/a$ . . . . .	18
2.4	Diagrama esquemático mostrando a ocupação dos níveis de energia permitidos em um isolante, um metal e um semiconductor. A escala vertical indica as energias dos diferentes estados e as regiões sombreadas mostram os estados ocupados por elétrons. . . . .	19
2.5	Esquema com sobreposição de banda representando um metal. Se a sobreposição for pequena, em vez de metal tem-se um semimetal. . . . .	20
2.6	Oscilação de Bloch em um modelo semiclássico. Mostrando o comportamento da energia e da velocidade na presença de um campo elétrico externo. . . . .	23
2.7	Principais transições metal-isolante. . . . .	25
2.8	Transição de Mott. Quando a largura da banda eletrônica $B$ é diminuída (pelo aumento da distância entre os átomos) sendo menor que a energia de interação elétron-elétron $U$ , ocorre localização induzida por correlação. . . . .	26
2.9	(a) Função de onda estendida. O livre caminho médio $\ell$ mede o comprimento de coerência quando o grau de desordem é fraco. (b) Função de onda localizada. Comprimento de localização $\xi$ mede a largura do pacote de onda. . . . .	28
2.10	Diagrama da densidade de estado para (a) Cristal. Energias não permitidas entre a banda de valência e a banda de condução, gap de energia. (b) Vidro. Todas as faixas de energia são permitida com uma faixa onde a densidade de estado é menor e formada por estados localizados, “pseudogap”, portanto uma transição do tipo delocalização-localização. . . . .	29
2.11	Transição de Anderson. Quando a largura da desordem $W$ excede a largura da banda $B$ há localização induzida por desordem. . . . .	30

2.12	Comportamento qualitativo da $\beta(g)$ para sistema de $d = 1, 2, 3$ dimensões. As setas sobre as curvas indicam o sentido que $g$ varia quando $L$ cresce. . . . .	34
2.13	Em (a) Coeficiente Lyapunov versus energia $E$ para distribuição da desordem com $\alpha < 0$ mostra que embora exista correlação, todos os estados ainda estão localizados. Em (b) Coeficiente Lyapunov versus energia $E$ para distribuição da desordem com $\alpha > 0$ mostra a presença de estados delocalizados. . . . .	37
2.14	Diagrama de fase para um sistema com correlação de longo alcance. Mostra a existência de uma fase de estados estendidos quando $\alpha > 2$ . . . . .	39
2.15	(a) Absorção vrs. Energia para um sistema com desordem não correlacionada. Mostra a presença de um pico não simétrico (b) Força de oscilador vrs. Energia mostra que a maior força de oscilador concentra-se na mesma região de energia onde há maior absorção. . . .	40
2.16	Função de onda versus Sítio atômico (a) Autoestado de energia $E = 5,40$ possui baixa força de oscilador e portanto, não contribui com o pico de absorção. (b) Autoestado de energia $E = 9,76$ possui alta força de oscilador e portanto, contribui com o pico de absorção. . . .	41
3.1	Energia de hopping gerada numericamente através da equação (3.2) para um sistema de 4000 sítios. O aumento da correlação de longo alcance $\alpha$ reduz gradualmente a aspereza da energia. . . . .	44
3.2	Participação média $\langle \xi \rangle$ versus $N$ para diferentes graus de correlação da desordem. A participação média cresce com o aumento da correlação e para $\alpha > 2$ ela cresce linearmente com o tamanho do sistema, caracterizando estados delocalizados (1). . . . .	48
3.3	Flutuação relativa da participação $\eta$ versus grau de correlação $\alpha$ para diferentes sistemas. Valores maiores de $\eta$ indicam estados localizados enquanto que os valores tendendo a zero indicam estados delocalizados. As curvas para os diferentes tamanhos da cadeia cruzam-se em um único ponto $\alpha = 2$ , onde ocorre a transição localização-delocalização (1). . . . .	49
3.4	Flutuação relativa da participação versus grau de correlação para diferentes magnitudes $\Delta = 0.5$ e $\Delta = 0.75$ . O ponto crítico $\alpha = 2.0$ não depende da magnitude da desordem $\Delta$ (1). . . . .	50
3.5	Espectro de absorção para uma cadeia de 1000 sítios com diferentes graus de correlação. Observa-se que o incremento de $\alpha$ aumenta a largura da banda de absorção até um $\alpha_c$ onde a partir de então o espectro passa a ter dois picos (1). . . . .	51
3.6	Energia de <i>hopping</i> obtida a partir da equação 3.2 para forte correlação ( $\alpha \gg 2$ ). Note que a curva é semelhante a uma curva da função cosseno. . . . .	52
3.7	Esquema que ilustra a origem dos dois picos no espectro de absorção óptica. Energia de <i>hopping</i> com forte correlação desacoplada em dois subsistemas de energias $J_0 - J^*$ e $J_0 + J^*$ , respectivamente. . . . .	54

- 3.8 Esquema que ilustra a origem dos dois picos do espectro de absorção, oriundos da presença de forte correlação da desordem. Os modos que representam o topo de cada sub-banda apresentam maior força de oscilação, respectivamente  $2(J_0 + J^*) \approx 12.0$  para a banda esquerda e  $2(J_0 - J^*) \approx 8.0$  para a banda direita. O modelo efetivo de duas sub-bandas explica qualitativamente e quantitativamente o espectro de absorção de dois picos. . . . . 55
- 3.9 Gráficos da função de onda versus sítio para cadeia de 1000 sítios (a) para autoestado de energia  $E = 8,51$  (b) para autoestado de energia  $E = 9,57$  e (c) para autoestado de energia  $E = 10,91$ . . . . . 56
- 3.10 Posição média do pacote eletrônico  $x(t)$  versus  $t$  para uma sistema de 500 sítios sujeito a um campo elétrico uniforme  $F = 1,0$ . Para correlação forte  $\alpha > 2$  observamos um comportamento oscilatório da posição média. Este comportamento indica a presença de de oscilações de Bloch. . . . . 57
- 3.11 Transformada de Fourier  $x(\omega)$  versus  $\omega$ . Para correlação fraca (a) e (b) não existe uma frequência típica, portanto não ocorrem oscilações de Bloch. Para correlação forte (c) e (d) a frequência de oscilação é igual ao valor do campo caracterizando oscilação de Bloch (1). 58

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>MODELOS DE CONDUÇÃO</b>	<b>15</b>
2.1	Modelo de Bloch . . . . .	15
2.1.1	Bandas de Energia . . . . .	18
2.1.2	Oscilação de Bloch . . . . .	21
2.2	Transição Metal - Isolante . . . . .	24
2.2.1	Transição de Mott . . . . .	25
2.2.2	Transição de Anderson . . . . .	27
2.3	Teoria de Escala . . . . .	31
2.4	Correlação no Modelo de Anderson . . . . .	35
2.5	Absorção Óptica . . . . .	39
<b>3</b>	<b>CORRELAÇÃO DE LONGO ALCANCE NO HOPPING</b>	<b>43</b>
3.1	O Modelo . . . . .	44
3.2	Campo Elétrico Nulo ( $T=0$ ) . . . . .	45
3.2.1	Propriedades de Localização . . . . .	45
3.2.2	Espectro de Absorção . . . . .	51
3.3	Campo Elétrico $T \neq 0$ . . . . .	55
3.3.1	Dinâmica Eletrônica . . . . .	55
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>60</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>62</b>



# 1

## INTRODUÇÃO

A física da matéria condensada é uma extensa área da física contemporânea que tem como foco de estudo as propriedades físicas da matéria, principalmente aquelas relacionadas às suas fases, abrangendo desde o estudo de fases sólidas e líquidas até superfluidos, condensados Bose-Einstein, supercondutores e inúmeras outras. Nas últimas décadas o interesse pela área aumentou consideravelmente, principalmente devido ao grande número de aplicações tecnológicas com as quais está ligada, como por exemplo, transistores, microprocessadores, circuitos integrados, fios supercondutores, lasers semicondutores que deram origem à comunicação óptica, além das contribuições para avanços na área das biotecnologias e outros (2).

As propriedades eletrônicas dos sólidos foram sempre fonte de muito interesse na comunidade, tanto devido às possibilidades de aplicação, como pelo estudo teórico em si. A descoberta do elétron em 1897 por J. J. Thompson permitiu o surgimento de modelos que buscavam explicar tais propriedades. O primeiro desses modelos a apresentar resultados satisfatórios foi proposto por Drude em 1900. Por esse modelo o metal era formado de íons fixos e elétrons livres que moviam de acordo com a teoria cinética clássica dos gases, assumindo ainda uma aproximação de elétrons independentes e aproximação de elétrons livres. Esse modelo previu corretamente a dependência proporcional da razão entre os coeficientes de condutividade térmica e elétrica com a temperatura do sistema (lei de Wiedemann-Franz) e ainda mostrou que a densidade de corrente elétrica no metal é proporcional ao campo elétrico aplicado nele, ou seja,  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$  (forma mais geral da Lei de Ohm). No entanto, esse modelo não foi capaz de explicar a diferença entre metais e isolantes e falhou na dependência

---

da condutividade elétrica com a temperatura (3, 4).

Com o advento da física quântica e da mecânica estatística no início do século XX, Sommerfeld aperfeiçoou o modelo de Drude, assumindo que o gás de elétrons livres seguia a lei de distribuição de Fermi-Dirac e desse modo, conseguiu preencher algumas lacunas deixadas pelo modelo anterior. Porém, ainda assim, esse modelo não foi suficiente para explicar as diferenças nas propriedades de condução entre metais e isolante. Isso somente foi possível em 1928, quando Bloch propôs um modelo no qual os elétrons interagem com os íons da rede por meio de um potencial periódico. A periodicidade do potencial fundamentou a origem de bandas permitidas e não permitidas, essenciais para diferenciar o comportamento metálico e isolante dos sólidos (5).

Até a década de 50 os estudos das propriedades de condução concentravam-se em sistemas de estruturas periódicas, pois a simetria desses sistemas simplificam os cálculos; no entanto, as características geradas pelas imperfeições são, em geral, mais interessantes. O trabalho pioneiro com sistemas não periódicos foi proposto por Anderson (6) e marcou uma nova era na física da matéria condensada. Dependendo da quantidade de desordem no sistema, Anderson mostrou que este poderia ser condutor ou isolante. Extensões desse modelo foram propostas e com elas novos ingredientes foram incorporados aos sistema (7, 8, 9, 10), como por exemplo, os efeitos de correlação, que resultaram em importantes efeitos sobre as propriedades de transportes dos sólidos. Esse trabalho apresenta um estudo sobre o transporte eletrônico em uma cadeia desordenada com correlação de longo alcance na energia de hopping e ainda o efeito da desordem sobre outras propriedades do sistema como a absorção óptica além de mostrar os efeitos da presença de campo elétrico nesse tipo de sistema.

Para uma melhor compreensão do assunto abordado nessa dissertação ela será dividida em dois capítulos. No capítulo 2 será apresentada uma visão geral do que existe na literatura e é essencial para a contextualização do modelo apresentado. Nas primeiras seções desse capítulo falaremos sobre o modelo de condução periódico de Bloch e como ele explica a diferença nas propriedades de condução entre metais, isolantes e semicondutores. Falaremos ainda como o campo elétrico atua nesse sistema gerando uma localização dinâmica do pacote de onda. Em seguida, será feito um breve estudo sobre transição de Mott, resul-

tado da interação entre elétrons, importante no contexto do transporte eletrônico. Para em seguida ser apresentado o modelo de Anderson. Dentro do contexto de sistema desordenado será mostrado as predições da teoria de escala para sistemas de baixa dimensionalidade e os efeitos da correlação de curto e longo alcance da desordem (com especial atenção a última, mais relevante nesse estudo), os quais geram comportamento não usual do modelo de Anderson. Para finalizar o capítulo será apresentada um estudo de como as propriedades de absorção ópticas dos sistemas podem ser modificadas com a presença de desordem correlacionada, para isso apresentamos alguns resultados da literatura para essas propriedades em sistemas desordenados. O capítulo 3 apresentará o modelo e os resultados estudado. Sendo os resultados divididos em duas partes. Na primeira parte abordamos o modelo sem a ação do campo elétrico e mostraremos por meio do cálculo da participação média, flutuação da participação e absorção as propriedades de transporte de um sistema desordenado com correlação de longo alcance na energia de *hopping*. Na segunda parte dos resultados são apresentados os cálculos para o sistema na presença de campo elétrico, onde nós estudamos o comportamento do pacote de onda eletrônico no decorrer do tempo. Por fim são apresentadas as nossas conclusões e sugeridas variações do nosso modelo que podem trazer fatos interessantes para o estudo de outros tipos de sistemas nessa mesma linha de interesse.

## 2

# MODELOS DE CONDUÇÃO

Apesar das importantes contribuições dadas pelo modelo de elétrons livres proposto por Drude e, posteriormente, aperfeiçoado por Sommerfeld, elas não foram suficientes para descrever completamente o transporte eletrônico nos sólidos e explicar as diferenças nas propriedades condutoras de metais, isolantes e semicondutores. Essas propriedades só puderam ser entendidas por meio da teoria de bandas de energia, a qual é consequência do modelo de potenciais periódicos (3). Mais tarde, novos elementos são inseridos no estudo dos modelos eletrônicos, como por exemplo, a presença de desordem no sistema ou a existência de interação entre os elétrons e diferentes resultados são encontrados, permitindo uma inovação no estudo do transporte eletrônico.

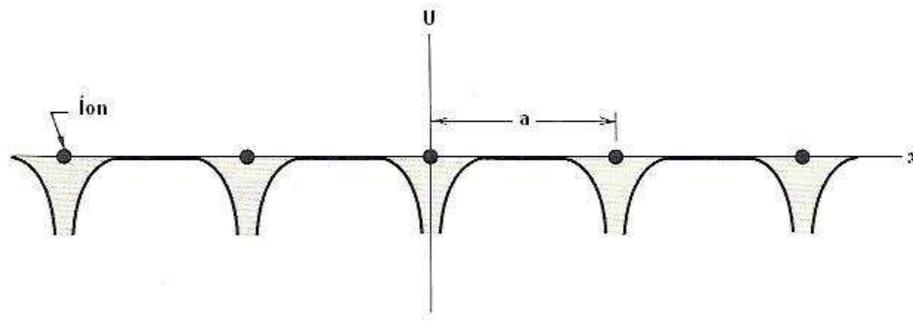
## 2.1 Modelo de Bloch

Considerando um sistema cristalino, ou seja, os íons dispostos em uma rede ordenada e periódica, é possível assumir que os elétrons interajam com os íons por meio de um potencial efetivo  $U(\mathbf{r})$  que possui a mesma periodicidade da rede, como pode ser observado na figura 2.1.

E portanto, pode ser expresso da seguinte maneira:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.1)$$

Figura 2.1: Esquema de um potencial periódico típico.



Fonte: Ashcroft, 1976.

onde  $\mathbf{R}$  é o vetor de rede de Bravais.

Por conveniência, assume-se que não há interação entre os elétrons e sendo o espaçamento característico da rede cristalina da ordem do comprimento de onda de De Broglie ( $1\text{\AA}$ ), o problema pode ter um tratamento quântico, o que nos leva à solução da equação de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi. \quad (2.2)$$

As soluções da equação 2.2 são autofunções, por meio das quais é possível estudar o comportamento do elétron na rede.

Bloch demonstrou que as autofunções da equação de onda para uma partícula submetida a um potencial periódico são dadas pelo produto entre uma onda plana e uma função com periodicidade igual a da rede cristalina, matematicamente expresso pelo chamado teorema de Bloch (11)

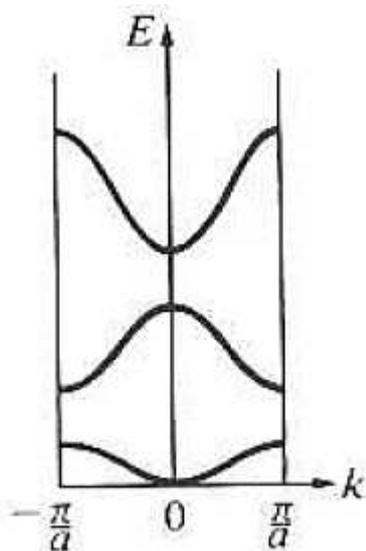
$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.3)$$

onde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  tem a periodicidade da rede e portanto,

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (2.4)$$

A função de onda de um elétron descrito pela equação 2.3 é chamada função de Bloch. As funções de Bloch podem ser agrupadas em pacotes de ondas que representam partículas que se propagam livremente no potencial criado pelos íons da rede.

Figura 2.2: Esquema reduzido de energia do elétron dentro da primeira zona de Brillouin. Para um mesmo valor de  $\mathbf{k}$  é possível obter diferentes valores de energias.



Fonte: Kittel, 2006.

Uma outra maneira de escrever o teorema de Bloch é dado pela equação abaixo:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}). \quad (2.5)$$

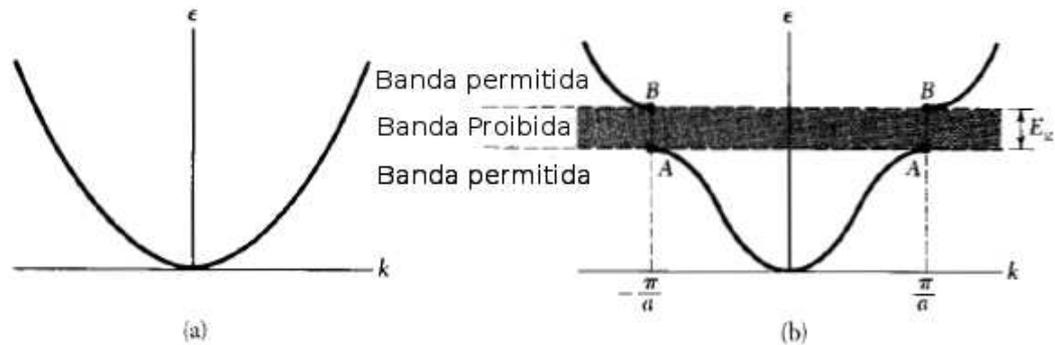
Esta equação mostra que quando uma translação  $R$  da rede cristalina é feita, a função de Bloch muda apenas por um fator de fase, ou seja, a partir da função de onda em um ponto da rede é possível conhecer a função de onda do elétron em outros pontos da rede.

É importante ressaltar, que assim como no modelo de elétrons livres,  $\mathbf{k}$  está associado às condições de contorno do sistema, no entanto não pode ser definido como  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$  pois o potencial não é constante e portanto a autofunção não é simultaneamente autofunção do operador momento linear, como é utilizado para o elétron livre.

Na teoria de Bloch o vetor de onda  $\mathbf{k}$  é um número quântico que caracteriza a invariância translacional do potencial periódico. Devido a essa periodicidade para cada vetor  $\mathbf{k}$  existe um conjunto de soluções que satisfaz a equação de Schrödinger 2.2 com diferentes autovalores (energias)<sup>1</sup>. Então, somente o índice  $\mathbf{k}$  não é suficiente para diferenciar as autoenergias, o que sugere a necessidade de mais um índice  $n$ , conhecido como índice de banda. Assim, para cada  $n$  existe um conjunto de níveis eletrônicos especificado por  $\epsilon_n(\mathbf{k})$  chamado banda

<sup>1</sup>Para mais detalhe consultar a referência (3).

Figura 2.3: (a) Energia versus número de onda para um elétron livre. (b) Energia versus número de onda para uma rede de potencial periódico. A banda proibida está associada à reflexão de Bragg, que acontece para  $k = \pm\pi/a$ .



Fonte: Kittel, 2006.

de energia. Como pode ser observado no esquema reduzido de energia, onde fica claro que para um mesmo  $k$  é possível ter energias diferentes. A distribuição dos elétrons nessas bandas é o que origina as diferenças entre metais, isolantes e semicondutores, como será melhor entendido na próxima seção.

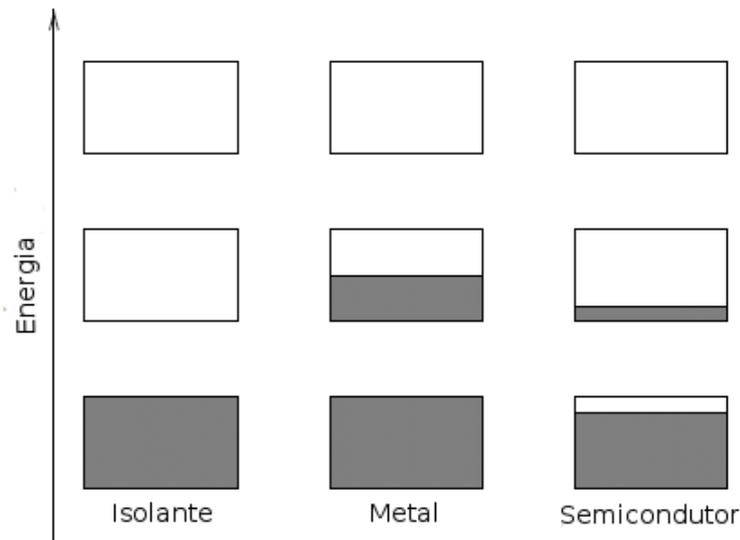
### 2.1.1 Bandas de Energia

A disposição periódica dos íons e a existência de interação entre os elétrons e os íons por meio de um potencial periódico deu origem ao modelo de bandas de energia. Por meio desse modelo é possível explicar como ocorre a condução eletrônica nos metais e nos isolantes. Essa foi, sem dúvida, a principal contribuição do modelo de Bloch.

A função de onda do elétron ao se propagar pelo cristal é espalhada pelos átomos em todas as direções, sendo que na maioria dos casos as contribuições de diferentes átomos cancelam-se umas com as outras. No entanto, em certas regiões os feixes difratados são observados, isso ocorre porque os raios refletidos pelos diferentes átomos interferem de forma construtiva. Para que essa interferência construtiva ocorra é necessário que a diferença de percurso entre os raios seja igual a um número inteiro  $n$  de comprimento de onda  $\lambda$ , ou seja, quando

$$2a \sin \theta = n\lambda, \quad (2.6)$$

Figura 2.4: Diagrama esquemático mostrando a ocupação dos níveis de energia permitidos em um isolante, um metal e um semiconductor. A escala vertical indica as energias dos diferentes estados e as regiões sombreadas mostram os estados ocupados por elétrons.



Fonte: Yuri, 2008.

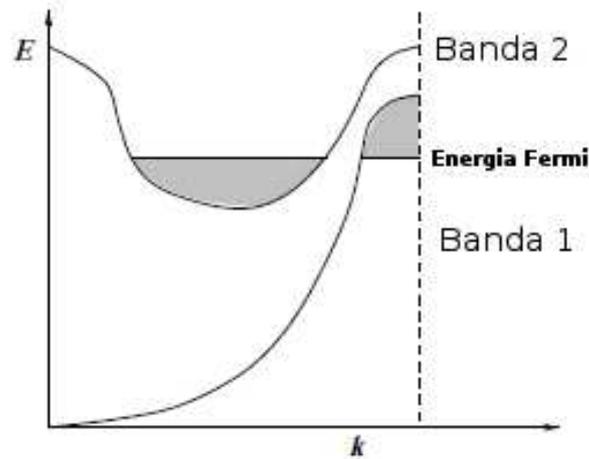
onde  $a$  é a constante de rede e  $\theta$  é o ângulo de incidência da função de onda.

A equação 2.6 foi proposta pelo físico W. L. Bragg e por isso é conhecida como lei de Bragg. Sendo válida apenas quando o comprimento de onda é da mesma ordem ou menor que a constante da rede.

Portanto, devido à periodicidade da rede cristalina as ondas ao se propagarem sofrem reflexões de Bragg. Em um cristal unidimensional a função de onda do elétron incide perpendicular ao plano, de modo que  $\theta = \pi/2$ . Sendo  $\lambda = 2\pi/k$ , a condição para que ocorra reflexão de Bragg é  $k = n\pi/a$ . Quando essa condição é satisfeita uma onda se propagando para a direita é refletida e passa a se propagar para a esquerda e vice-versa, de modo que a onda torna-se estacionária. Como consequência, no ponto onde ocorrem essas reflexões não existe solução para a equação de Schrödinger e se formam as chamadas bandas proibidas (band gap), como pode visto na figura 2.3. A largura da banda proibida é a diferença entre as energias de dois estados estacionários.

Uma vez entendida a formação da estrutura de bandas e conhecendo a posição da superfície de Fermi de um sólido, definida como a superfície no espaço do  $\mathbf{k}$  formada pelos estados eletrônicos que ocupam o nível mais alto de um sistema quântico no estado fundamental, é possível determinar o comportamento do elétron no sistema e conseqüentemente a natureza

Figura 2.5: Esquema com sobreposição de banda representando um metal. Se a sobreposição for pequena, em vez de metal tem-se um semimetal.



Fonte: Yuri, 2008.

eletrônica do sólido.

Quando o sólido possui bandas completamente preenchidas ou completamente vazias, isto é, a superfície de Fermi se encontra no limite da banda, o sistema será um isolante. A banda totalmente preenchida é separada da banda vazia por uma banda proibida, portanto para excitar um elétron é necessário um campo elétrico muito intenso, capaz de modificar a estrutura eletrônica.

Se o sólido possui bandas parcialmente preenchidas, o nível de Fermi se encontra no meio da banda de energia, portanto, o elétron pode facilmente mudar de nível energético quando excitado, o que caracteriza um metal, observe a figura 2.4. É importante mencionar que quando um sólido apresenta bandas sobrepostas também pode apresentar um comportamento metálico, caso que pode ser visto pela figura 2.5.

Existem ainda os semicondutores, que são uma espécie de isolante, mas a banda proibida é menor do que a de um isolante padrão, então a energia de excitação do elétron é menor, embora no zero absoluto esse sólido se comporte como isolante.

Como visto até aqui, por meio do modelo de bandas de Bloch foi possível determinar as propriedades de condução eletrônica dos metais e dos condutores. Apesar de muito interessante para o tratamento de alguns sistemas, potenciais completamente periódicos são muito difíceis de serem encontrados na natureza; os sólidos reais sempre apresentam algum grau de

desordem e/ou algum tipo de interação entre as partículas, por isso modelos que levam em consideração a interação elétron-elétron ou a presença de desordem foram posteriormente propostos, como será discutido nas seções 2.2.1 e 2.2.2.

### 2.1.2 Oscilação de Bloch

Um outro ponto interessante a ser estudado no modelo de Bloch é o comportamento dos elétrons na presença de um campo elétrico uniforme. Na física do estado sólido esse estudo tem atraído a atenção tanto dos teóricos quanto dos experimentais, isso porque muitas das propriedades dos sólidos, como o espectro de energia, podem ser medidas em experimentos com campos externos (12, 13).

Para descrever a resposta dos elétrons à aplicação de um campo elétrico externo que varia lentamente sobre o pacote de onda, utiliza-se um modelo *semiclássico*, o qual consiste em obter as equações de movimento para cada elétron através do formalismo clássico de Hamilton e do uso da quantização do momento eletrônico (14, 3).

Considere um sistema periódico descrito pelo hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = \epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{r}) - e\mathbf{E}\mathbf{r}, \quad (2.7)$$

sendo  $\epsilon(\mathbf{k})$  a energia cinética, que corresponde as auto-energias do modelo de Bloch,  $V(r)$  a energia potencial periódica do sistema e  $e\mathbf{E}\mathbf{r}$  a energia devido o trabalho do campo elétrico  $\mathbf{E}$ .

As equações do movimento de Hamilton são dadas por:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{r}}. \quad (2.8)$$

Assumindo que a energia cinética não depende da posição e sendo o momento do elétron escrito como  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ , a derivada temporal do momento na equação 2.8 pode ser reescrita como:

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{E}. \quad (2.9)$$

Integrando ambos os lados dessa equação chega-se a

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) + \frac{e\mathbf{E}t}{\hbar}. \quad (2.10)$$

Essa equação mostra como o vetor de onda de um elétron se comporta em um potencial periódico sujeito a um campo externo, na ausência de espalhamento. Lembrando que devido a periodicidade do sistema, o valor de  $\mathbf{k}$  varia entre  $-\pi/a$  a  $\pi/a$ , correspondente a zona de Brillouin. Ou seja, o elétron em um sistema periódico na presença de campo elétrico apresenta um movimento oscilatório no espaço do  $\mathbf{k}$ , uma vez que  $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(-\mathbf{k})$ . Na literatura esse comportamento é conhecido como Oscilações de Bloch (15).

Voltando à equação 2.8, partindo da derivada temporal da posição e novamente utilizando  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ , chega-se à equação da velocidade

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad (2.11)$$

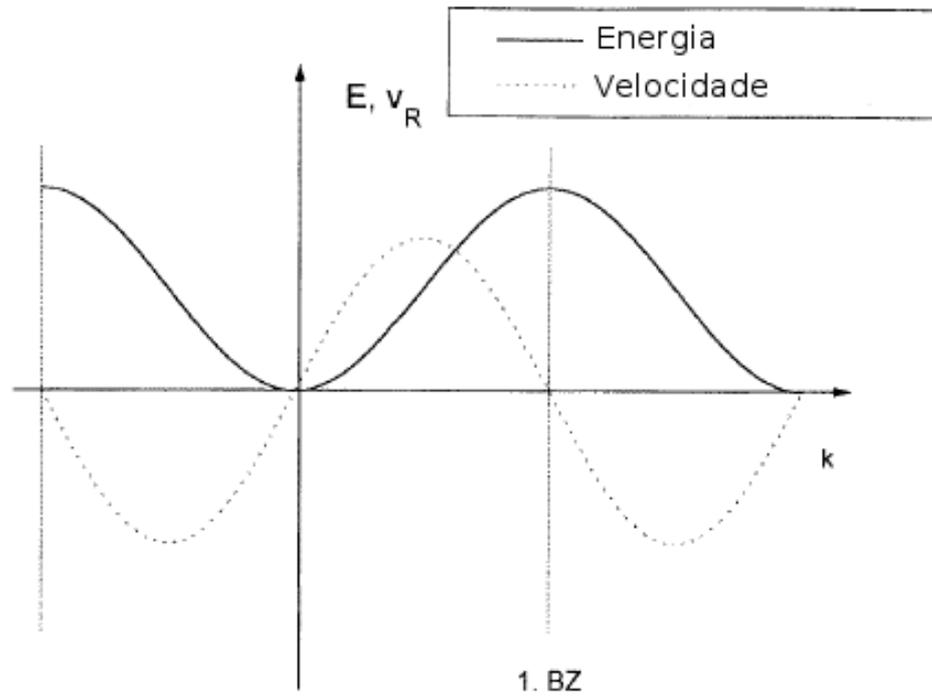
Esta é chamada velocidade de grupo e é igual a velocidade de um elétron livre, exceto pelo fato que a energia  $\epsilon(\mathbf{k})$  do elétron livre pode aumentar infinitamente. No modelo semiclássico, as transições entre bandas não são permitidas e portanto, a energia de um elétron de Bloch deve permanecer confinada nos limites da banda em que originalmente se encontra.

Para ilustrar o comportamento da energia e da velocidade de um sistema periódico na presença de um campo elétrico constante e paralelo ao sistema, observe a figura 2.6.

Essa figura mostra o comportamento da energia e da velocidade dentro da primeira zona de Brillouin (BZ). Note que na primeira metade do ciclo o elétron move com o campo e ganha energia, na segunda metade move contra o campo e perde energia (16). É importante frisar que o campo não é suficiente para que o elétron mude de banda, portanto essa variação da energia ocorre dentro de uma única banda, o que caracteriza o comportamento oscilatório.

Para determinar o tempo que o pacote de onda gasta para percorrer a zona de Brillouin, ou seja, período T de uma oscilação do pacote de onda, utiliza-se a equação 2.10, de modo

Figura 2.6: Oscilação de Bloch em um modelo semiclássico. Mostrando o comportamento da energia e da velocidade na presença de um campo elétrico externo.



Fonte: Leo, 1998.

que:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}(T) - \mathbf{k}(0) &= \frac{2\pi}{a} = \frac{e\mathbf{E}T}{\hbar} \\ T &= \frac{2\pi\hbar}{e\mathbf{E}a}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

e conseqüentemente, a frequência  $\omega$  é:

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{e\mathbf{E}a}{\hbar}. \quad (2.13)$$

Considerando  $\frac{ea}{\hbar} = 1$  é possível mostrar que a frequência de oscilação do pacote de onda é igual ao valor do campo elétrico aplicado ao sistema, essa é uma característica das oscilações de Bloch.

Para determinar a amplitude da oscilação  $\delta r$  no espaço real, toma-se a equação 2.11.

Sendo as funções contínuas dentro da banda pode-se escrever:

$$\delta r = r - r_0 = \frac{1}{\hbar} \frac{\delta \epsilon(\mathbf{k})}{\delta \mathbf{k}}, \quad (2.14)$$

Como deseja-se determinar a largura de uma oscilação, então o tempo em questão é o próprio período, o intervalo no espaço-k é  $2\pi/a$  e o intervalo de energia é exatamente a largura da banda B, e portanto,

$$\delta r = \frac{B}{eE}. \quad (2.15)$$

Observe que a largura da oscilação está intimamente ligada ao valor do campo elétrico aplicado. Portanto, é possível concluir que a presença de campo elétrico numa rede de potencial periódico provoca a localização do pacote de onda em torno de uma região  $\delta r$ .

A observação experimental das oscilações de Bloch somente foi possível com o desenvolvimento das super-redes semicondutoras (17), as quais abriram caminho para o surgimento de novas observações experimentais (16).

O estudo desenvolvido até aqui está relacionado apenas á sólidos perfeitos e portanto, ideais. No entanto, é de interesse da comunidade científica entender como se dá o transporte eletrônico em sistemas mais próximos dos sistemas reais, ou seja, sistemas que assumem a presença de impurezas e defeitos nos sólidos. Este é o caso do modelo de condução proposto por Anderson, no qual ele considera não periodicidade do potencial devido a presença de imperfeições no sólido (como será discutido nas próximas seções). Após o trabalho de Anderson muitos trabalhos sobre sistemas desordenados foram propostos e conseqüentemente, surgiu o interesse em entender quais os efeitos do campo elétrico sobre esses sistemas (18, 19).

## 2.2 Transição Metal - Isolante

Como vimos na seção anterior, a teoria de bandas conseguiu explicar porque alguns materiais são condutores e outros não. Porém existem alguns sistemas que não comportam como previsto por esse modelo, ou seja, teoricamente esses sistemas deveriam ser metálicos (isolantes) mas experimentalmente comportam-se como isolantes (metais). Isso ocorre

Figura 2.7: Principais transições metal-isolante.

Transição	Função de Onda		Energia Característica	Mudanças na Transição M-I	Condições de Transição
	Lado Metálico da Transição	Lado Isolante da Transição			
Bloch	Extendido	Extendido	Largura de Banda B	Bandas em parte cheias → bandas totalmente preenchidas ou vazias	-
Mott	Extendido	Localizado	Energia de correlação elétron-elétron $U = e^2 / r$	Localização induzida por correlação	$U > B$
Anderson	Extendido	Localizado	Largura W de distribuição da energia do sítio	Localização induzida por desordem	$W > B$

Fonte: Zallen, 1983.

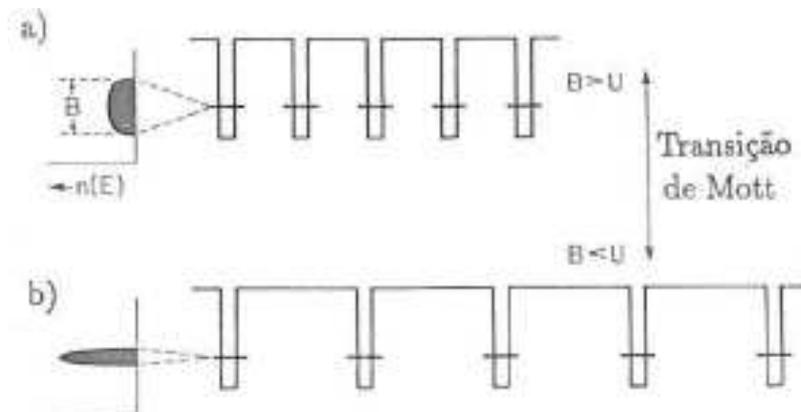
porque a teoria de bandas não leva em consideração os efeitos das interações entre os elétrons e nem os efeitos de desordem. Quando a energia de interação elétron-elétron é comparável a energia cinética o sistema pode sofrer uma transição metal-isolante, conhecida como transição de Mott. No limite de elétrons não interagentes, na presença de desordem, o sistema pode sofrer um outro tipo de transição, passando de estados metálicos para estados isolantes devido aos efeitos de localização de Anderson, a qual é o foco de estudo deste trabalho.

A tabela 2.7 apresenta um resumo sobre as principais transições Metal-Isolante conhecidas. O primeiro tipo é a transição proposta pela teoria de banda para um sólido cristalino, discutida na seção 2.1.1, e os outros dois tipos serão discutidos nas próximas seções.

### 2.2.1 Transição de Mott

A transição de Mott refere-se a uma situação na qual a aproximação de elétrons independentes falha, isto é, a energia de interação entre os elétrons não pode ser desprezada, uma vez que ela é comparável à energia cinética. Por exemplo, a teoria de bandas não prevê

Figura 2.8: Transição de Mott. Quando a largura da banda eletrônica  $B$  é diminuída (pelo aumento da distância entre os átomos) sendo menor que a energia de interação elétron-elétron  $U$ , ocorre localização induzida por correlação.



Fonte: Zallen, 1983.

a possibilidade das correlações entre os elétrons produzirem num sólido um estado fundamental isolante. Desse modo, um material com este estado fundamental isolante, na teoria de bandas, é predito como um metal. Para entender como isso acontece observe a figura 2.8.

Na figura 2.8 os átomos são representados por poços de potenciais ocupados com um elétron de valência cada, no limite do átomo isolado. As linhas horizontais representam o nível de energia do elétron de valência em cada átomo. Quando os átomos são aproximados os níveis de energia se desdobram formando uma banda de largura  $B$ , como esboçado no gráfico à esquerda da figura. Tomando como referência os níveis de energia dos átomos livres, a banda de energia de um cristal desse tipo se estende aproximadamente de  $-B/2$  a  $B/2$ . Se a banda estiver apenas parcialmente preenchida, a energia média de um elétron de valência no cristal é aproximadamente  $-B/4$ , energia inferior à energia dos elétrons livres, e responsável pela coesão metálica. Note porém, que aumentando a distância entre os átomos, a teoria de banda ainda prevê um comportamento delocalizado para o elétron, embora o correto que seria o elétron comportasse como um átomo isolado.

A solução para esse paradoxo foi dada por Mott (20, 21), quando considerou a interação coulombiana para o caso de dupla ocupação de um mesmo orbital. Sendo os níveis de energia duplamente degenerados, eles podem ser ocupados por zero, um ou dois elétrons, com as respectivas probabilidades  $1/4, 1/2, 1/4$ . Porém, a dupla ocupação eletrônica gera um custo energético igual à  $U = e^2/r$ , onde  $e$  é a carga elementar e  $r$  é a distância entre dois elétrons.

Sendo assim, a energia média de um elétron delocalizado é dada por  $-B/4+U/4$ . Conclui-se portanto, que para haver a localização do elétron induzida pela correlação é necessário que a energia de interação seja maior que a largura da banda para um sólido cristalino,

$$U > B. \quad (2.16)$$

Diferentemente da transição metal-isolante de Bloch (que possui estados estendidos em ambas as fases, metálica e isolante), a transição de Mott apresenta estados estendidos apenas na fase metálica, caracterizando-se por uma transição do tipo delocalização-localização (ou metal-isolante) para os estados eletrônicos. Ela acontece quando uma alteração na separação interatômica provoca uma mudança relativa das duas energias características do sistema (a largura de banda  $B$  e a energia de interação elétron-elétron  $U$ ), como mostrado na figura 2.8 (22).

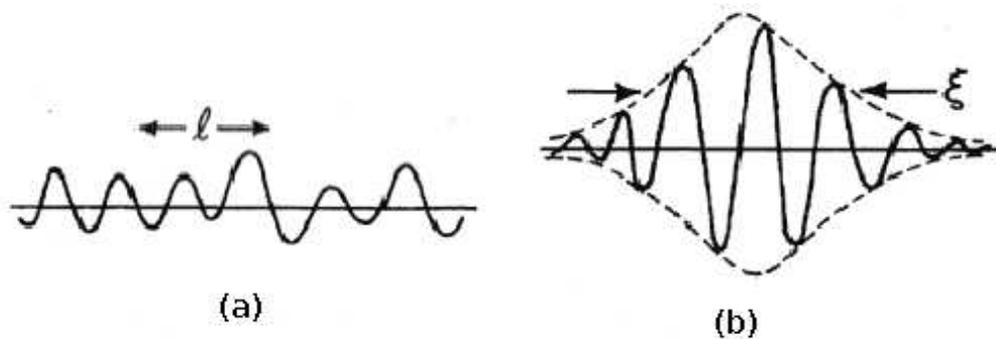
### 2.2.2 Transição de Anderson

Um outro importante tipo de transição eletrônica foi estudado por Philip Anderson em 1958. A transição de Anderson, como ficou conhecida, está relacionada à presença de defeitos nos sólidos, os quais destroem a invariância translacional do sistema. As descobertas feitas por Anderson marcaram uma nova era no estudo das propriedades dos sólidos, pois a maioria dos sólidos reais não são cristais perfeitos e portanto, desconhecer a presença de impurezas pode gerar, em alguns modelos, previsões equivocadas a respeito de algumas propriedades físicas.

Como acreditava-se que a física dos sistemas desordenados poderia ser entendida como uma aproximação da física dos sistemas ordenados, a importância desse trabalho demorou alguns anos para ser reconhecida.

Antes de falar sobre o modelo de Anderson propriamente dito, é interessante entender como a presença de impureza modifica o comportamento do elétron em um sólido. Considere um sistema constituído por elétrons livres, cujas funções de onda propagam por todo o sólido. Quando uma barreira de potencial é introduzida nesse sistema, a função de onda do elétron

Figura 2.9: (a) Função de onda estendida. O livre caminho médio  $\ell$  mede o comprimento de coerência quando o grau de desordem é fraco. (b) Função de onda localizada. Comprimento de localização  $\xi$  mede a largura do pacote de onda.



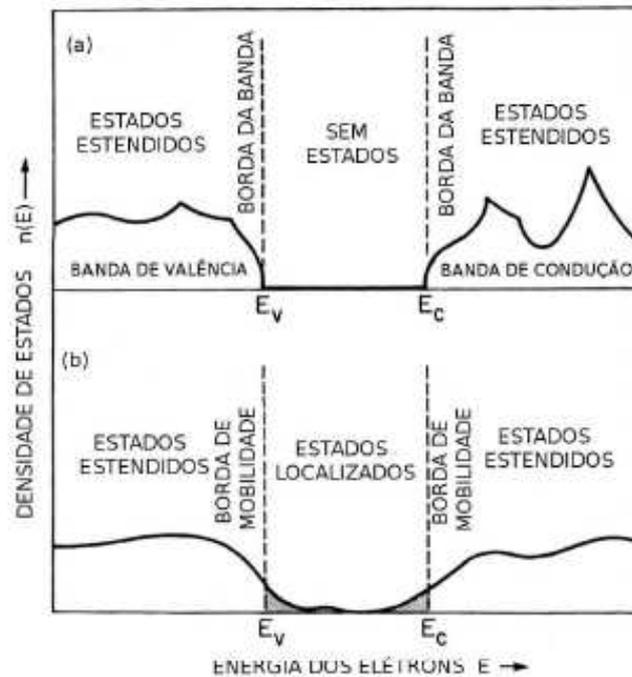
Fonte: Zallen, 1983.

é parcialmente refletida e parcialmente transmitida por essa barreira. Se mais barreiras forem introduzidas a função de onda será refletida em cada uma das barreiras; as parcelas da função de onda refletidas e transmitidas podem gerar interferências construtivas e destrutivas dependendo da diferença de fase existente entre elas. Essa diferença de fase é influenciada pela intensidade das barreiras de potencial e pela distância entre elas.

Portanto, se as barreiras de potencial forem de mesma intensidade e igualmente espaçadas entre si, ou seja, um potencial periódico (modelo de Bloch), as interferências serão construtivas e a função de onda será estendida por toda cadeia (comportamento metálico), como previsto por Bloch.

Porém, se o potencial for aleatório, podem ocorrer duas situações distintas. A primeira delas, quando o grau de desordem é fraco, a função de onda sofre algumas reflexões, perde a coerência de fase, mas continua estendida (comportamento metálico). O comprimento da coerência é dado pelo livre caminho médio ( $\ell$ ), figura 2.9(a). Contudo, se o grau de desordem for forte, as reflexões sofridas pela função de onda causam interferências destrutivas as quais induzem uma localização exponencial da função de onda em torno de uma pequena região do espaço (comportamento isolante), isto é,  $\psi \propto \exp(-r/\xi)$ , onde  $\xi$  é o comprimento de localização e mede a largura do pacote de onda como mostra a figura 2.9(b). Para um grau de desordem intermediário pode ocorrer uma transição metal-isolante, chamada transição de Anderson.

Figura 2.10: Diagrama da densidade de estado para (a) Cristal. Energias não permitidas entre a banda de valência e a banda de condução, gap de energia. (b) Vidro. Todas as faixas de energia são permitida com uma faixa onde a densidade de estado é menor e formada por estados localizados, “pseudogap”, portanto uma transição do tipo delocalização-localização.



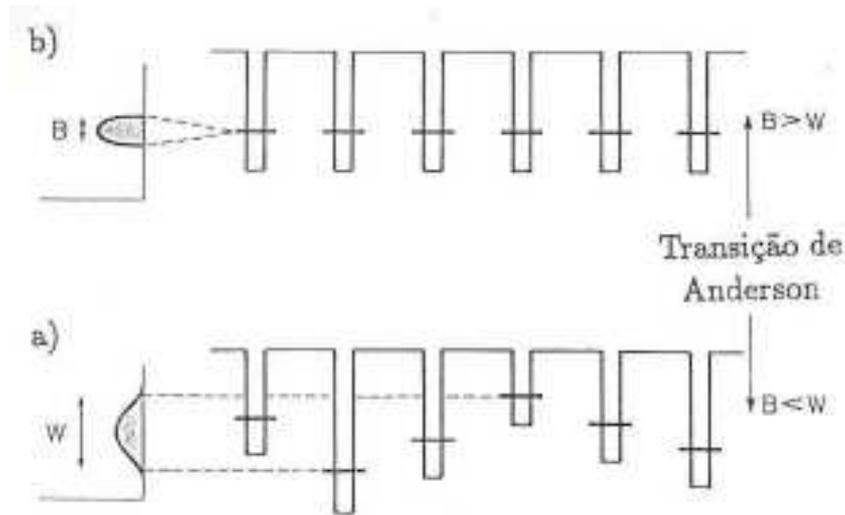
Fonte: Zallen, 1983.

Diferente das outras transições estudadas, a transição metal-isolante de Anderson não ocorre pela transferência de elétrons da banda de valência para a banda de condução, mas sim, pela localização do pacote de onda devido à presença de impureza, portanto nesse tipo de transição não existe “gap” de energia, a princípio todas as faixas de energia são permitidas; o que ocorre é que em determinadas regiões da banda a densidade de estados  $n(E)$  é pequena e composta por estados eletrônicos exponencialmente localizado, como pode ser observado na figura 2.10.

A transição delocalização-localização na figura 2.11 ocorre porque a desordem “bagunça” os níveis de energia dos sítios atômicos, através da alteração das profundidades dos poços de potencial. Observe que na figura 2.11(a), todos os poços de potencial representando os sítios atômicos possuem a mesma profundidade, enquanto que na figura 2.11(b) a profundidade dos poços varia de sítio para sítio de forma aleatória. Onde  $W$  é a largura da distribuição das energias dos sítios atômicos.

A idéia principal dos efeitos da desordem no sistema foi matematicamente demonstrada

Figura 2.11: Transição de Anderson. Quando a largura da desordem  $W$  excede a largura da banda  $B$  há localização induzida por desordem.



Fonte: Zallen, 1983.

por Anderson no artigo intitulado “Absence of diffusion in certain random lattices” (6). Nesse artigo ele assumiu que o movimento dos elétrons não se dava em função da temperatura, mas através de saltos quânticos, *hopping*, entre os sítios da rede e provou que em baixas densidades o transporte eletrônico não ocorre, ficando a função de onda localizada em uma pequena região do espaço. Considerando a aproximação *tight-binding* o hamiltoniano do modelo de Anderson é dado por:

$$\mathbf{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} V_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (2.17)$$

onde  $|i\rangle$  representa o orbital atômico centrado no sítio  $i$ ,  $\varepsilon_i$  é a energia de sítio (energia potencial) que está distribuída aleatoriamente em uma banda de largura  $W$  e o termo  $V_{ij}$  é o *hopping* (energia cinética) entre os sítios  $i$  e  $j$ , neste caso limitado para os primeiros vizinhos. A energia Coulombiana é desprezada.

Para introduzir desordem nesse sistema, Anderson assumiu que a função de distribuição  $P(\varepsilon)$  das energias  $\varepsilon_i$  é dada por:

$$p(\varepsilon_i) = \begin{cases} \frac{1}{W} & |\varepsilon_i| \leq \frac{W}{2}, \\ 0 & \text{outros.} \end{cases}$$

Utilizando teoria de perturbação Anderson, mostrou que condição de localização estava relacionada com a razão  $W/B$  entre a largura da distribuição dos potenciais e a banda de energias permitidas para um elétron no sólido cristalino. Ou seja, a localização de Anderson ocorre quando:

$$W > B \tag{2.18}$$

Uma forma de entender qualitativamente essa relação é pensar que se a diferença de energia entre dois sítios quaisquer da rede for no máximo da ordem de  $B/z$ , onde  $B$  é a largura da banda cristalina e  $z$  é o número de coordenação da rede, o elétron pode mover-se entre os sítos. Entretanto, se essa diferença de energia for maior que  $B/z$  não poderá haver transporte eletrônico entre os sítos, uma vez que os sítos estarão efetivamente desacoplados.

Inicialmente, essa condição de localização de Anderson somente foi percebida em sistemas tridimensionais. Em um primeiro momento a transição de Anderson não foi verificada em sistemas de baixa dimensionalidade, uma vez que os efeitos de desordem são fortes nestes sistemas e portanto, todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem. O estudo da dependência da transição de Anderson com o tamanho do sistema foi realizado através da teoria de escala desenvolvida por Abrahams e colaboradores em 1979.

## 2.3 Teoria de Escala

Como discutido nas seções anteriores, Anderson foi pioneiro no estudo dos efeitos da desordem sobre as propriedades de transporte dos sólidos e em quantificar a quantidade necessária de desordem para que ocorra a localização da função de onda eletrônica. Seu trabalho abriu caminho para inúmeros estudos sobre esse tipo de sistema.

Um dos importante trabalhos a obter informações sobre a transição metal-isolante induzida por desordem foi proposto por Abrahams e colaboradores (7), no qual estabeleceu-se a dependência da transição de Anderson com a dimensão do sistema. Os autores basearam-se na hipótese de que uma quantidade única, a condutância generalizada  $g$ , é capaz de controlar

a transição em  $T = 0$ .

O modelo proposto por Abrahams e colaboradores (7) utilizou a reformulação do modelo de Anderson proposta por Thouless (23), pela qual o sólido seria constituído por várias caixas de volume  $L^d$  que continham os sítios e as energias características do sistema seriam a energia de desordem dentro das caixas, relacionada ao espaçamento médio entre os sítios  $\Delta E$ , e a energia de acoplamento das caixas  $\delta E$ , influenciada pelas mudanças nas condições de contorno, análogamente as energias  $W$  e  $B$  do modelos de Anderson. E desse modo, definiu-se condutância generalizada como:

$$\frac{1}{g} \approx \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (2.19)$$

A condutância generalizada mede a influência da quantidade de desordem sobre as propriedades de condução do sistema, semelhante a razão  $W/B$  no modelo de Anderson. De maneira que estados estendidos são sensíveis as mudanças nas condições de contorno ( $\Delta E < \delta E$ ), enquanto estados localizados não são ( $\Delta E > \delta E$ ). Uma maneira elegante de estabelecer a dependência da condutividade  $\omega$  com  $\delta E$  é por meio de argumentos heurístico baseados no princípio da incerteza.

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D}, \quad (2.20)$$

onde  $t_D$  é o tempo gasto pelo pacote de onda eletrônico para difundir até os contornos da caixa de tamanho  $L$ .

Assumindo que o elétron realiza um movimento browniano dentro da caixa, o tempo de difusão pode ser dado como:

$$t_D = \frac{L^2}{D}, \quad (2.21)$$

sendo  $D$  a constante de difusão.

Sabe-se ainda, que pela relação de Einstein a condutividade no limite macroscópico pode ser escrita em termos da constante de difusão

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (2.22)$$

onde  $n(E)$  é a densidade de estados dada por

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (2.23)$$

Combinando as equações 2.22 e 2.21 e substituindo em 2.20 obtém-se

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}. \quad (2.24)$$

Substituindo a equação 2.23 na equação acima obtém-se a dependência de escala do parâmetro  $g$

$$g(L) = \left(\frac{\hbar}{e^2}\right) \sigma L^{d-2}. \quad (2.25)$$

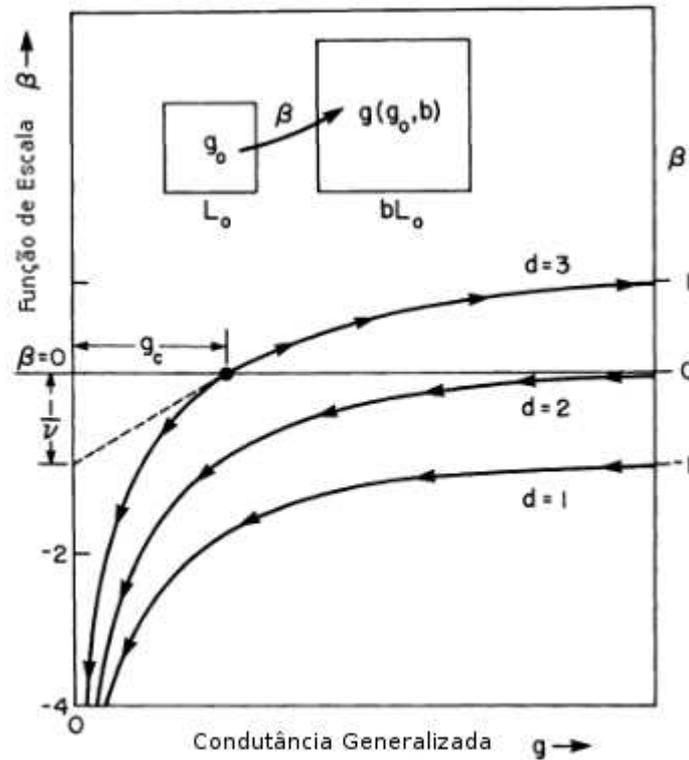
O termo  $\sigma L^{d-2}$  é a condutância de um cubo (d-dimensional) de lado  $L$  e condutividade  $\omega$ . Logo a função  $g(L)$  pode ser entendida como a condutância generalizada em unidades de  $\frac{e^2}{h}$ . Assim essa teoria estuda a dependência de  $g(L)$  com o comprimento de escala utilizado. Portanto seja  $g_0$  a condutância generalizada para um sistema composto de caixas acopladas de volume  $L_0^d$ , a teoria de escala assume que dado  $g_0$  em uma escala de comprimento  $L_0$  é possível obter  $g$  numa escala maior  $L = bL_0$ , onde  $L_0$  é determinado pelo valor anterior  $g_0$  e  $b$  é um fator de escala (24). Sendo o fator de escala uma transformação contínua ( $b = 1 + \epsilon, \epsilon \ll 1$ ) o comportamento de escala de  $g$  pode ser determinado pela função:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (2.26)$$

Portanto, para  $\beta$  positivo, a condutividade generalizada  $g$  cresce com o comprimento  $L$ , o que caracteriza um comportamento metálico; enquanto que para  $\beta$  negativo, a condutividade generalizada  $g$  decresce com o crescimento de  $L$ , caracterizando um comportamento isolante.

O comportamento qualitativo da função  $\beta(g)$  nos limites assintóticos ( $g = 0$  e  $g \rightarrow \infty$ ) foi obtido por Abrahams *et al* (7) e pode ser visto pela curva mostrada na figura 2.12. No

Figura 2.12: Comportamento qualitativo da  $\beta(g)$  para sistema de  $d = 1, 2, 3$  dimensões. As setas sobre as curvas indicam o sentido que  $g$  varia quando  $L$  cresce.



Fonte: Abrahams *et al.*, 1979.

limite de  $g \rightarrow \infty$ , usando as equações 2.25 e 2.26 é possível chegar em:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (2.27)$$

E portanto, para sistemas uni, bi e tridimensional a função de escala tende para os valores abaixo, os quais também podem ser vistos na figura (2.12).

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

É importante lembrar que a equação 2.25 só é válida para sistemas macroscópicos, pois a relação de Einstein (eq. 2.22) só é verdadeira nesse limite. Portanto, para calcular a função de escala para valores muito pequenos de  $g$ , a condutância generalizada deve ser escrita como  $g(L) \propto e^{-\gamma L}$ , onde  $\gamma$  é o expoente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização  $\xi$ );

isso é possível porque nesse limite o acoplamento é fraco e a desordem é forte e portanto, pela teoria de Anderson, os estados são exponencialmente localizados. Portanto, a equação 2.26 quando a condutância generalizada tende a zero é dada por:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (2.28)$$

Ou seja, quando  $g \rightarrow 0$   $\beta \rightarrow \infty$ , independente da dimensão. Pelo diagrama 2.12 é possível observar que para  $d = 1$  e  $d = 2$  a condutância generalizada sempre diminui com o aumento de  $L$ . Enquanto que para  $d = 3$  a curva apresenta um ponto chamado de ponto fixo instável  $g_c$ , onde a curva muda o comportamento, assim  $g < g_c$  a condutância decresce quando  $L$  cresce ( $\beta < 0$ ), caracterizando um comportamento isolante, e para  $g > g_c$  a condutância cresce com o comprimento ( $\beta > 0$ ), comportamento metálico. Desse modo, a teoria de escala mostra a dependência da transição de Anderson com a dimensão do sistema, tendo estados localizados para 1 e 2 dimensões e a possibilidade de transição metal-isolante para sistema 3D.

No decorrer dos mais de 30 anos que se passaram desde da publicação do artigo pioneiro sobre a teoria de escala da localização e importantes progressos ocorreram nessa área, como por exemplo, o aumento da precisão dos expoentes críticos os quais descrevem o comportamento da transição de Anderson, além do estudo de transição de Anderson em sistemas tridimensionais em várias classes de simetrias, entre outras, como pode melhor ser visto na referência (25).

## 2.4 Correlação no Modelo de Anderson

O estudo de sistemas desordenados por Anderson mostrou a existência de um tipo de transição metal-isolante decorrente de uma mudança no padrão da função de onda devido à presença de desordem. Anos depois, Abrahams demonstrou, através de uma teoria de escala, que em sistemas de 1 e 2 dimensões, independente da quantidade de desordem, os auto-estados são localizados e que em sistemas de 3 dimensões é possível co-existir estados localizados e extendidos. No entanto, no final da década de 80, novos estudos mostraram a

possibilidade de haver estados estendidos ou transição localização-delocalização mesmo em sistemas de baixa dimensionalidade.

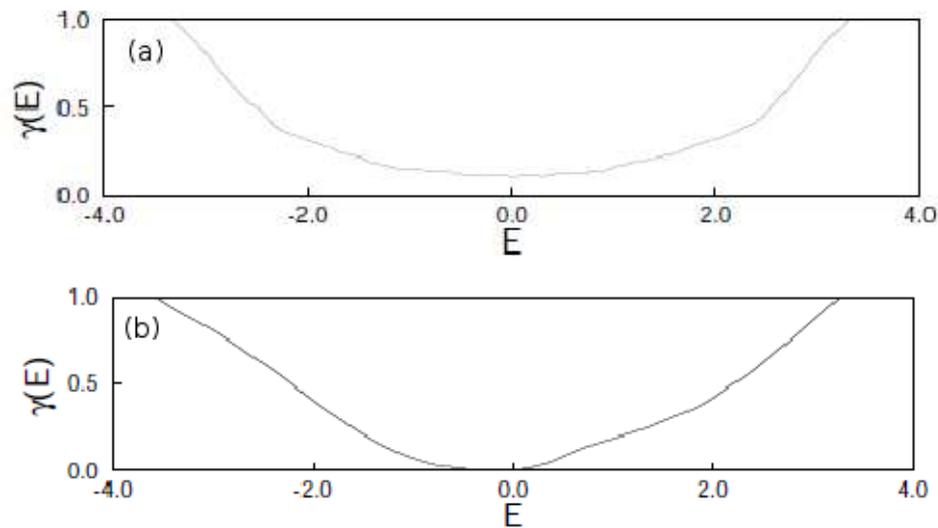
Em 1989, J. C. Flores investigou as condições para a existência de uma energia crítica, para qual ocorresse transporte eletrônico em uma rede unidimensional (9). Ele considerou o sistema com desordem na diagonal e fora da diagonal e assumiu existir correlação de curto alcance entre as desordens. Com esse modelo, Flores observou que dependendo do tipo de correlação utilizada diferentes propriedades de transporte poderiam ser encontradas. Esse trabalho apresentou os primeiros indícios da violação da teoria de escala (7), embora em condições bem restritas.

Uma outra evidência da violação da teoria proposta por Abrahams foi vista por Dunlap e colaboradores em 1990 (8). Com um modelo *tight binding* unidimensional, Dunlap estudou a natureza dos estados eletrônicos usando um sistema tipo liga binária com energias de sítios  $\epsilon_A$  e  $\epsilon_B$ , distribuídas aleatoriamente com probabilidade  $q$  e  $1-q$ , sendo que umas das energias sempre ocorre aos pares ( $\dots\epsilon_A\epsilon_A - \epsilon_B - \epsilon_A\epsilon_A - \epsilon_B - \epsilon_B - \epsilon_B - \epsilon_A\epsilon_A - \epsilon_B\dots$ ). A energia de *hopping*, responsável pelo transporte entre os primeiros vizinhos, é constante  $V$ .

Utilizando simulação numérica, Dunlap *et. al.* mostrou que o desvio quadrático médio de uma partícula inicialmente localizada no modelo de dímeros-aleatórios torna-se delocalizada após um tempo longo. Quando  $|\epsilon_A - \epsilon_B| \leq 2V$  o sistema apresenta uma energia ressonante  $\epsilon_A$ , para a qual a função de onda é delocalizada (estendida). A importância deste modelo esta no fato de que ele pode ser usado para guiar a síntese de novos materiais de alta condutividade (8).

Na mesma linha dos dois últimos trabalhos discutidos, alguns outros foram propostos (26, 27, 28, 29, 30) e todos mostram a possibilidade, sobre certas condições, de estados estendidos em sistema de baixa dimensionalidade. O que existe em comum entre estes trabalhos, e que não foi levado em consideração na teoria de escala, é a presença de correlação de curto alcance na desordem. No entanto, não é possível afirmar que esses modelos apresentam uma transição metal-isolante verdadeira, pois no limite termodinâmico os estados estendidos não contribuem para a densidade de estados. Por outro lado, correlação de longo alcance pode induzir transição metal-isolante em sistemas 1D, como foi mostrado por Moura e Lyra (10).

Figura 2.13: Em (a) Coeficiente Lyapunov versus energia  $E$  para distribuição da desordem com  $\alpha < 0$  mostra que embora exista correlação, todos os estados ainda estão localizados. Em (b) Coeficiente Lyapunov versus energia  $E$  para distribuição da desordem com  $\alpha > 0$  mostra a presença de estados delocalizados.



Fonte: Moura, 1999.

Sequências aleatórias com correlações de longo alcance são funções correlacionadas que não apresentam comprimento de escala característicos (31) e sua densidade espectral é aproximadamente uma lei de potência do tipo:

$$S(k) \propto \frac{1}{k^\alpha}. \quad (2.29)$$

A função  $S(k)$  é obtida através da transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_n \epsilon_m \rangle$  e  $k$  é o vetor de onda relacionado com as ondulações no potencial (24). Um bom exemplo desse tipo sequência na natureza, pode ser visto no nucleotídeo das moléculas de DNA (32).

Em 1998 Moura e Lyra investigaram a natureza dos estados eletrônicos de modelo de Anderson 1D, com correlação de longo alcance nas energias *on site* e mostraram que todos os elétrons permanecem localizados para  $\alpha < 2$ , mas que em  $\alpha > 2$  existem valores finitos de energia com estados estendidos, mesmo no limite termodinâmico (veja figura 2.13), ao contrário do que mostraram os modelos de dímeros, os quais exibiam delocalização apenas em energias particulares (10).

A inovação deste modelo foi considerar a distribuição da desordem como sendo um

movimento Browniano fracionário, com densidade espectral tipo lei de potência (eq.:2.29). Para isso, os autores utilizaram uma abordagem baseada no uso da transformada de Fourier discreta (33) e definiram a distribuição aleatória da energia de sítio com correlação de longo alcance para o modelo de Anderson unidimensional como sendo:

$$\epsilon_i = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{(1-\alpha)} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right), \quad (2.30)$$

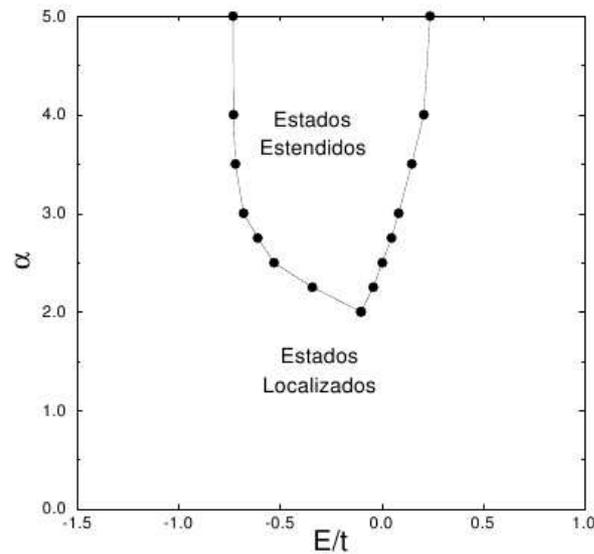
Onde  $N$  é o número de sítios,  $\phi_k$  são as  $N/2$  fases aleatórias distribuídas uniformemente no intervalo  $[0, 2\pi]$  e  $\alpha$  é o parâmetro que controla a correlação da sequência. De modo que quando  $\alpha = 0$  o modelo de Anderson tradicional (sem correlação) é recuperado. A natureza dos estados eletrônicos foi então, investigada por meio do comportamento do coeficiente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização), obtido através de um processo de renormalização da matriz do operador de Green associado ao Hamiltoniano.

Moura e Lyra mostraram então, que para  $\alpha < 2$  o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente zero, para qualquer energia dentro da banda, o que indica estados exponencialmente localizados, como mostra a figura 2.13(a); para  $\alpha > 2$  mostraram a existência de uma faixa de energia em que o coeficiente de Lyapunov é zero, o que indica a existência de estados estendidos próximo ao centro da banda. Portanto, o modelo exibe uma verdadeira transição de Anderson com energias críticas (*mobility edge*), estáveis no limite termodinâmico, separando as fases de estados localizados e estendidos para sistema de baixa dimensionalidade, como pode ser visto no diagrama de fase 2.14.

Os resultados apresentados até aqui e a forte presença de correlação de longo alcance na natureza estimularam a produção de diversos trabalhos teóricos e experimentais recentes (34, 35, 36, 37, 38, 39, 40), assim como este trabalho de dissertação.

A maior parte do presente capítulo foi dedicada ao estudo das propriedades de transporte eletrônico dos sólidos, onde foi visto que sólidos ideais são condutores se apresentarem banda de valência parcialmente preenchidas (ou se existir superposição de bandas) e são isolantes se sua banda de condução estiver completa (11). No caso de sistemas com a presença de desordem ou impurezas as propriedades diferem bastante do caso periódico, apresentando

Figura 2.14: Diagrama de fase para um sistema com correlação de longo alcance. Mostra a existência de uma fase de estados estendidos quando  $\alpha > 2$ .



Fonte: Moura, 1999.

propriedades de estados localizados ou delocalizados dependendo da quantidade de desordem e de correlação da desordem (6, 7, 8, 9, 10). Essa parte final do capítulo será destinada a discutir sobre a influência da desordem em outra propriedade interessante dos sólidos, a absorção óptica. As propriedades ópticas são fonte de muito interesse da comunidade científica devido as suas diversas possibilidades de aplicações e por está ligada à caracterização de materiais.

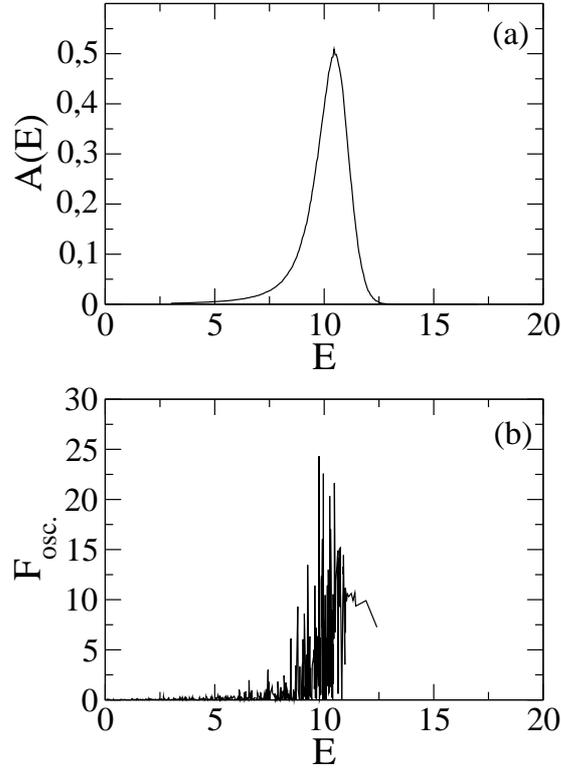
## 2.5 Absorção Óptica

Em sólidos ordenados os estados excitados estendem-se por toda a cadeia (11) isso faz com que o decaimento da taxa de radiação diminua linearmente com o tamanho do sistema. No entanto, na prática os sólidos sempre apresentam alguma desordem a qual afeta o comportamento delocalizado e as propriedades ópticas observadas.

Em 1991 Fidler e colaboradores estudaram o efeito da desordem, tanto na diagonal quanto fora da diagonal, sobre as propriedades ópticas, principalmente a absorção linear e a taxa de emissão superradiante, em um agregado molecular (41).

A fim de tentar entender os efeitos da desordem sobre as propriedades ópticas de um sis-

Figura 2.15: (a) Absorção vrs. Energia para um sistema com desordem não correlacionada. Mostra a presença de um pico não simétrico (b) Força de oscilador vrs. Energia mostra que a maior força de oscilador concentra-se na mesma região de energia onde há maior absorção.



Fonte: Autora, 2011.

tema desordenado consideramos a descrição feita nas referências (41, 42) baseada no modelo de éxcitons de Frenkel (43). Uma cadeia linear de  $N$  moléculas de dois níveis identicamente polarizável descrita pelo hamiltoniano abaixo

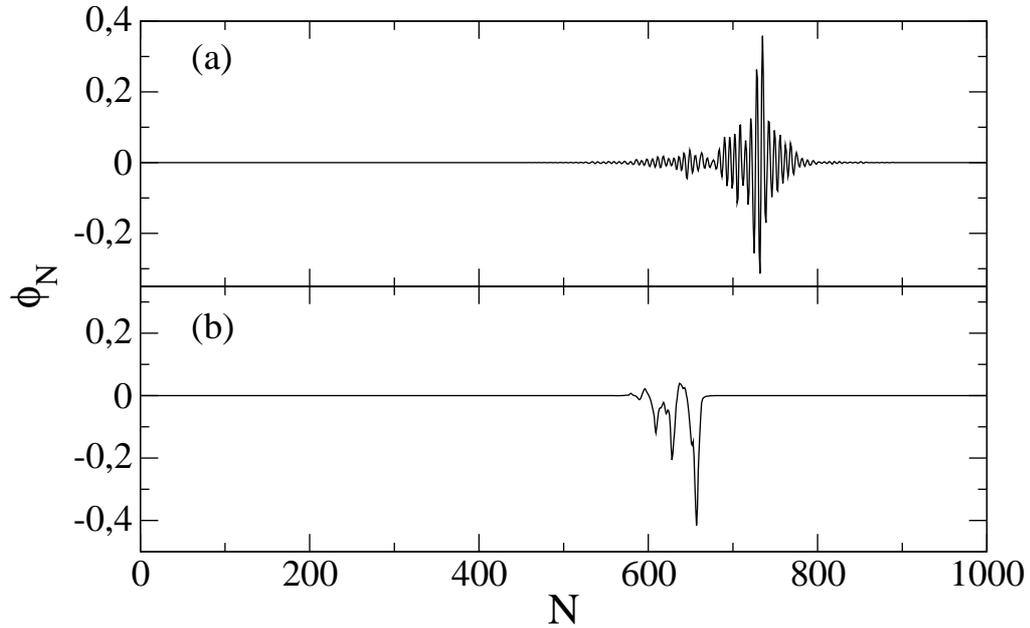
$$H = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n J_{n,m} |m\rangle \langle n|, \quad (2.31)$$

onde  $|n\rangle$  denota o estado no qual a molécula  $n$  está excitada e todas as outras moléculas estão no estado fundamental,  $\varepsilon_n$  é a energia da molécula  $n$  e  $J_{m,n}$  é a energia de interação entre as moléculas  $n$  e  $m$ .

A partir da diagonalização do Hamiltoniano tem-se que a função de onda para  $j$ ésimo autovetor  $\mathbf{a}_j = (a_{j,1}, \dots, a_{j,N})$  é especificada pela equação:

$$|\Psi_j\rangle = \sum_{n=1}^N a_{j,n} |n\rangle. \quad (2.32)$$

Figura 2.16: Função de onda versus Sítio atômico (a) Autoestado de energia  $E = 5,40$  possui baixa força de oscilador e portanto, não contribui com o pico de absorção. (b) Autoestado de energia  $E = 9,76$  possui alta força de oscilador e portanto, contribui com o pico de absorção.



Fonte: Autora, 2011.

Para estudar a influência da natureza localizada ou delocalizada dos autoestados nas propriedades ópticas é necessário considerar a interação da radiação com o sistema. O acoplamento do vetor de onda  $\mathbf{k}$  do campo com o autoestado  $j$  é dado por:

$$\sum_{n=1}^N a_{j,n}\mu \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n), \quad (2.33)$$

aqui  $\mu$  é a magnitude do momento de dipolo e  $\mathbf{r}_n$  é a posição da molécula  $n$ .

Assumindo que o comprimento do agregado  $L$  é pequeno comparado ao comprimento de onda óptico, então  $|k|L \ll 1$  e portanto o acoplamento dado pela equação 2.33 reduz para uma transição de dipolo

$$\mu_j \sum_{n=1}^N a_{j,n}\mu. \quad (2.34)$$

O quadrado dessa equação 2.34 ( $\mu_j^2$ ) é proporcional à força de oscilador do sistema, a qual trata de um parâmetro adimensional que determina a absorção de um fóton pelo sistema (41).

A partir desses dados, os autores calcularam a absorção:

$$A(E) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_j \Delta(E - E_j) \mu_j^2 \right\rangle \quad (2.35)$$

Os gráficos em 2.15 mostram o comportamento da absorção e da força de oscilador em função da energia, obtidos a partir da metodologia descrita acima, para uma cadeia de 1000 sítios com desordem aleatória na energia de hopping. No gráfico 2.15(a) observamos a presença de apenas um pico no espectro de absorção. No gráfico 2.15(b) vemos a que a força de oscilador é maior em torno das mesmas energias correspondentes ao pico de absorção.

Na tentativa de entender como a desordem afeta a absorção o gráfico 2.16 apresenta o comportamento da função de onda para duas energias distintas. Em (a) tem-se a função de onda para a energia  $E = 5,40$ , que corresponde a autoestados com fraca força de oscilador e portanto, não contribui para a absorção do sistema. Em (b) tem-se a função de onda para autoestados de energia  $E = 9,76$ , os quais apresentam elevada força de oscilador e portanto contribui para o espectro de absorção.

Com a comprovação na literatura que a correlação da desordem favorece o surgimento de características diferentes no transporte eletrônico, interesse sobre o comportamento das propriedades ópticas para esse tipo de desordem também surgiu. Em 2005 Díaz (44) e colaboradores mostraram que a espectroscopia óptica também pode se utilizada para detectar transição de Anderson. Os autores calcularam a absorção óptica para um sistema unidimensional desordenado com correlação de longo alcance nas energias de sítio e observaram que para um grau de correlação  $\alpha > \alpha_c$  o espectro de absorção ao invés de um pico, como acontece quando o sistema não possui correlação, possui dois picos (44). Isso indica que o incremento da correlação provoca uma mudança na distribuição da força de oscilação, como será mais discutido na próximo capítulo.

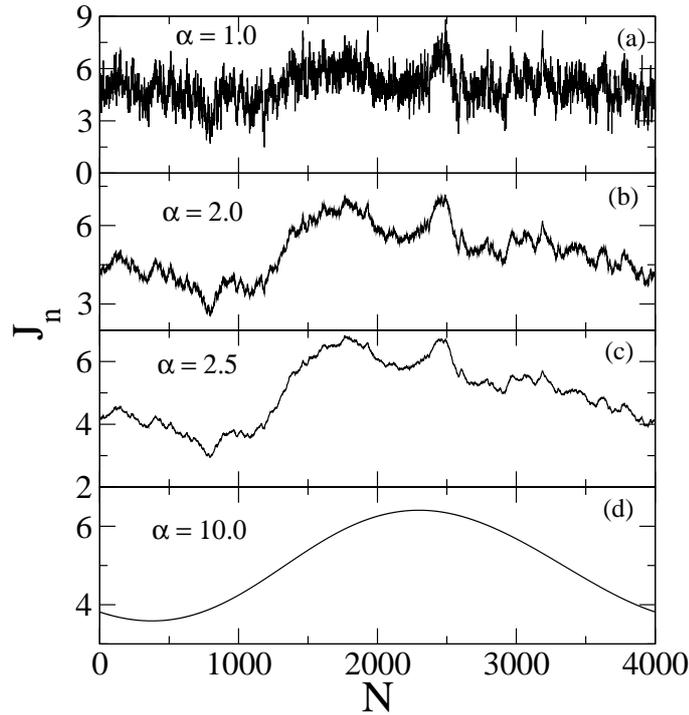
# 3

## MODELO DE ANDERSON 1D COM CORRELAÇÃO DE LONGO ALCANCE NO HOPPING

Como foi mostrado no capítulo 2, a presença de correlação na desordem origina um efeito não usual do modelo de Anderson, a existência de estados delocalizados para sistema de baixa dimensionalidade. Neste capítulo apresentamos um estudo sobre a natureza eletrônica de um sistema unidimensional desordenado com correlação de longo alcance fora da diagonal, cujos resultados confirmam a possibilidade de transição de Anderson, mostram os efeitos desse tipo de desordem sobre a formação de bandas de absorção e ainda indicam a presença de oscilações de Bloch devido a presença de campo elétrico para determinados graus de correlação da desordem.

Os nossos resultados estão divididos em duas partes: na primeira parte foram calculadas, na ausência de campo elétrico, a participação média, a flutuação da participação e a influência da desordem para a formação de bandas de absorção, enquanto que na segunda parte são apresentados os efeitos da presença de campo elétrico sob as propriedades de transporte do sistema.

Figura 3.1: Energia de hopping gerada numericamente através da equação (3.2) para um sistema de 4000 sítios. O aumento da correlação de longo alcance  $\alpha$  reduz gradualmente a aspereza da energia.



Fonte: Autora, 2011.

### 3.1 O Modelo

Para o nosso estudo consideramos uma rede unidimensional desordenada de  $N$  sítios iguais, distribuídos aleatoriamente. Cada sítio é ocupado por um átomo, que por sua vez possui apenas um orbital. Desprezamos a interação entre elétrons e assumimos que a interação entre os íons é de primeiros vizinhos. O Hamiltoniano numa aproximação *tight-binding* para esse modelo é dado por:

$$\mathbf{H} = \sum_n^N (\varepsilon - eT\mathbf{a}n) |n\rangle \langle n| + \sum_n^{N-1} J_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1|. \quad (3.1)$$

Os autoestados estão escritos na representação de orbitais de Wannier  $|n\rangle$  e  $\varepsilon$  é a energia potencial de cada sítio, como os sítios são iguais podemos considerar  $\varepsilon = 0$ , sem perda de generalidade.  $\mathbf{T}$  é o campo elétrico,  $\mathbf{e}$  é a carga do elétron e  $\mathbf{a}$  é a constante de rede.  $J_{n,n+1}$  é a energia de *hopping* do sistema, considerada apenas entre os primeiros vizinhos.

A desordem com correlação de longo alcance é inserida no modelo assumindo a energia

de *hopping* escrita como uma distribuição aleatória cuja densidade espectral é do tipo  $S(k) = 1/k^\alpha$ , como discutido na seção 2.4. Portanto, a energia de *hopping* é dada por (10, 45):

$$J_n = C_\alpha(N) \sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right), \quad (3.2)$$

onde  $\phi_k$  são as fases aleatórias do sistema, distribuídas uniformemente dentro do intervalo  $[0, 2\pi]$  e  $C_\alpha(N)$  é uma constante de normalização, escolhida de maneira que a variância (ligada a quantidade de desordem do sistema) seja  $\Delta = 1$  ( $\Delta = \sqrt{\langle J_n^2 \rangle - \langle J_n \rangle^2}$ ). Consideramos ainda,  $\langle J_n \rangle = J_0 = 5$  para evitar  $\langle J_n \rangle = 0$ , valores de energia que não são interessantes para os nossos cálculos. O grau de correlação é controlado pelo parâmetro  $\alpha$  e seu efeito sobre a energia de *hopping* pode ser visto na figura 3.1.

## 3.2 Campo Elétrico Nulo (T=0)

A partir do modelo descrito na seção anterior 3.1, nós estudamos as propriedades de transporte eletrônico para um sistema desordenado com correlação de longo alcance fora da diagonal (na energia de *hopping*). Inicialmente, analisamos o sistema sem a presença de campo elétrico, onde calculamos a participação média e a flutuação da participação e ainda, o espectro de absorção óptico.

### 3.2.1 Propriedades de Localização

Para calcularmos a participação média e a flutuação da participação na ausência de campo elétrico nós substituímos  $T = 0$  na equação 3.1, de maneira que o Hamiltoniano do sistema para campo elétrico nulo é dado por:

$$\mathbf{H} = \sum_n^{N-1} J_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1|. \quad (3.3)$$

Considerando a função de onda escrita como expansão nas bases de Wannier

$$\Psi_n = \sum c_n |n \rangle, \quad (3.4)$$

onde  $c_n$  é a amplitude da função de onda no sítio  $n$ .

A equação de Schrödinger independente do tempo ( $H\Psi = E\Psi$ ), na representação de Wannier, resolvida para esse sistema é dada por

$$t_{n-1,n}c_{n-1} + t_{n,n+1}c_{n+1} = Ec_n. \quad (3.5)$$

A equação (3.5) foi resolvida numericamente por um processo de diagonalização direta, utilizando a subrotina Lapack (46). Como solução encontramos as autoenergias e as autofunções do sistema, com as quais foi possível calcular parâmetros como a participação  $\xi$  e a flutuação relativa da participação  $\eta$ , as quais nos possibilitaram estudar a natureza eletrônica do sistema.

Número de participação ou simplesmente participação mede o grau de localização do pacote de onda, pois mostra o número de sítios onde a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron é diferente de zero. Formalmente, é definida como (47, 48):

$$\xi = \frac{\sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^4}. \quad (3.6)$$

Para entender como a participação se relaciona com o grau de localização a seguinte análise pode ser feita. Considerando que as autofunções estejam normalizadas, a soma de todas as probabilidades de encontrar o elétron no sistema deve ser igual a 1. No caso de uma cadeia pura os autoestados são todos estendidos e a probabilidade de encontrar o elétron é igual em toda a cadeia, portanto

$$\begin{aligned} \sum_n |c_n|^2 = 1 &\Rightarrow N|c_n|^2 = 1 \\ |c_n| &= \frac{1}{\sqrt{N}}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Deste modo a participação dada pela equação (3.6) torna-se igual a

$$\xi = \frac{1}{\sum_n (1/\sqrt{N})^4} = N. \quad (3.8)$$

Isso mostra que para um sistema estendido a participação tende ao tamanho do sistema, ou seja, todos os sítios participam da função de onda e portanto, no limite termodinâmico a participação diverge.

Para o caso de estados localizados a participação é finita,

$$\xi = \frac{1}{1 + 0 + 0 + \dots} = 1, \quad (3.9)$$

uma vez que os elétrons estão localizados em um sítio.

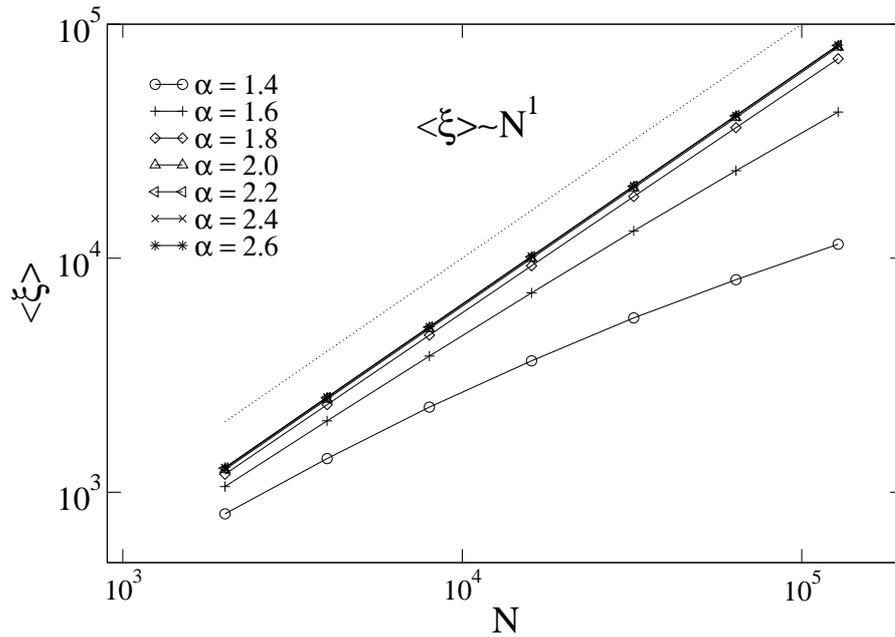
No nosso modelo quando  $\alpha = 0$ , ou seja, desordem não correlacionada, o modelo de Anderson tradicional é recuperado e portanto, para qualquer grau de desordem o sistema ( $1D$ ) é isolante (função de onda exponencialmente localizada) (7). Então um dos nossos objetivos é encontrar a dependência da participação com o incremento da correlação.

Para isso, calculamos a participação média  $\langle \xi \rangle$  para sistemas de  $N = 500$ ,  $N = 1000$ ,  $N = 2000$ ,  $N = 4000$ ,  $N = 8000$ ,  $N = 16000$ ,  $N = 32000$ ,  $N = 64000$  e  $N = 128000$  sítios, em pequenas janelas ( $\Delta E = 1,0$ ) em torno do centro da banda. Essa região foi escolhida porque o estudo da literatura (10, 45) nos mostra que a transição de fase ocorre no centro da banda. É importante frisar ainda, que excluimos em nossos cálculos, uma região pequena,  $\Delta E = 0,2$ , em torno da energia  $E = 0$ , pois para essa energia, quando a desordem esta na energia de *hopping*, o comprimento de localização é originalmente grande, o que indica que as autofunções já são estendidas, independentes do grau de correlação (49, 45, 50), comportamento esse que não é interessante para o nosso estudo. Deste modo, a participação média é dada por:

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{N_E} \sum_{E=-0,5}^{E=0,5} \xi(E), \quad (3.10)$$

onde  $N_E$  é o número de autoestados dentro do intervalo  $[-0,5;0,5]$  e seus valores são da ordem

Figura 3.2: Participação média  $\langle \xi \rangle$  versus  $N$  para diferentes graus de correlação da desordem. A participação média cresce com o aumento da correlação e para  $\alpha > 2$  ela cresce linearmente com o tamanho do sistema, caracterizando estados delocalizados (1).



Fonte: Autora, 2011.

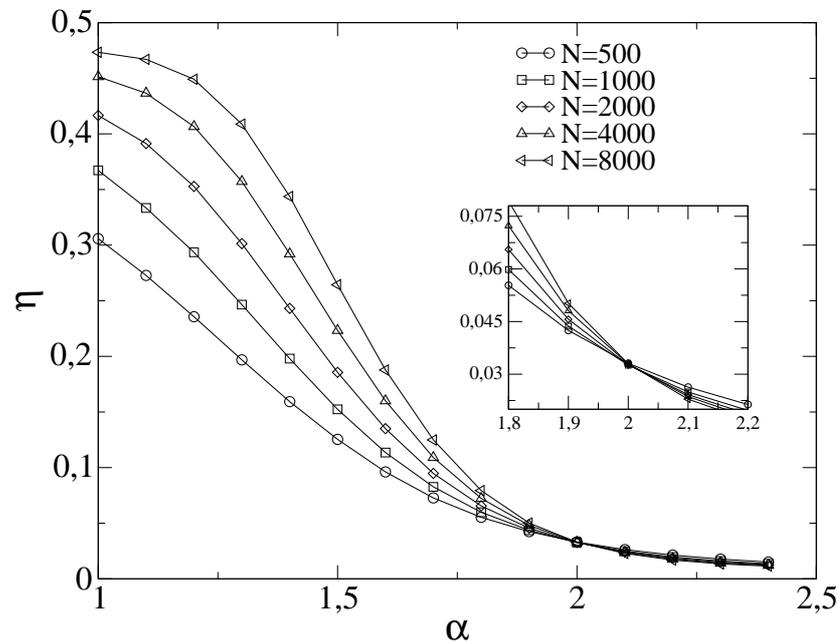
de  $10^6$ , o que nos dá uma boa precisão numérica. Os resultados são mostrados no gráfico (3.2).

O gráfico  $\langle \xi \rangle$  versus  $N$  foi obtido para diferentes graus de correlação e mostra que a participação média aumenta a medida que o grau de correlação aumenta, indicando que estados estendidos surgem no sistema com o incremento da correlação. De fato sabemos que isso ocorre com esse tipo de correlação (10) e portanto mais sítios participam do pacote de onda.

Podemos observar também, que a participação média cresce com o aumento do sistema. Note que para  $\alpha < 2$  as curvas sugerem uma possível estabilidade do crescimento da participação média para tamanhos maiores<sup>1</sup>, o que é esperado para estados localizados. No intervalo de  $1 < \alpha < 2$  o crescimento da participação média com o tamanho do sistema indica a presença de estados delocalizados, mas não se trata de estados estendidos verdadeiros (45). Já para  $\alpha > 2$  o crescimento do sistema é acompanhado pelo aumento da  $\langle \xi \rangle$ , o que indica estados delocalizados. Como podemos ver por meio da curva pontilhada, a participação média cresce linearmente com o tamanho do sistema e portanto, diverge no limite termodinâmico.

<sup>1</sup>Tamanhos maiores do sistema não puderam ser calculados por restrição numérica.

Figura 3.3: Flutuação relativa da participação  $\eta$  versus grau de correlação  $\alpha$  para diferentes sistemas. Valores maiores de  $\eta$  indicam estados localizados enquanto que os valores tendendo a zero indicam estados delocalizados. As curvas para os diferentes tamanhos da cadeia cruzam-se em um único ponto  $\alpha = 2$ , onde ocorre a transição localização-delocalização (1).



Fonte: Autora, 2011.

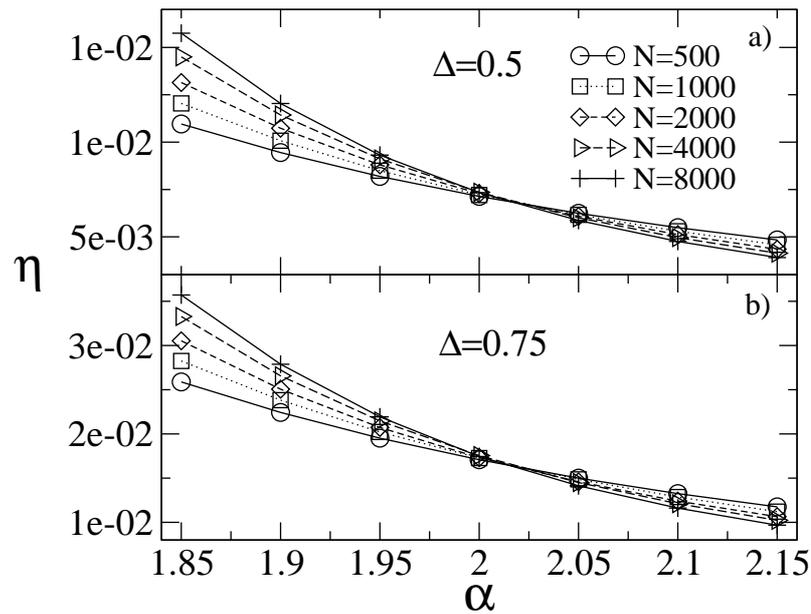
Esses resultados confirmam mais uma vez, existência de transição de Anderson em sistema de baixa dimensionalidade.

A partir da observação do gráfico 3.2 é possível deduzir que uma transição localização-delocalização ocorre em  $\alpha = 2$ . Entretanto, uma análise mais criteriosa deve ser feita. Para monitorar o ponto onde existe uma transição de Anderson calculamos a flutuação relativa da participação (51, 35, 36), definida como

$$\eta = \frac{\sqrt{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2}}{\langle \xi \rangle}. \quad (3.11)$$

Esse parâmetro é utilizado porque fortes flutuações das autofunções representam uma das marcas da transição de Anderson. Para estados localizados o desvio quadrático médio é grande em comparação à participação média e portanto a flutuação é grande, o que não ocorre para estados delocalizados, onde o desvio quadrático médio é pequeno quando comparado à participação média e então a flutuação tende a zero. Como pode ser visto por meio do gráfico 3.3.

Figura 3.4: Flutuação relativa da participação versus grau de correlação para diferentes magnitudes  $\Delta = 0.5$  e  $\Delta = 0.75$ . O ponto crítico  $\alpha = 2.0$  não depende da magnitude da desordem  $\Delta$  (1).

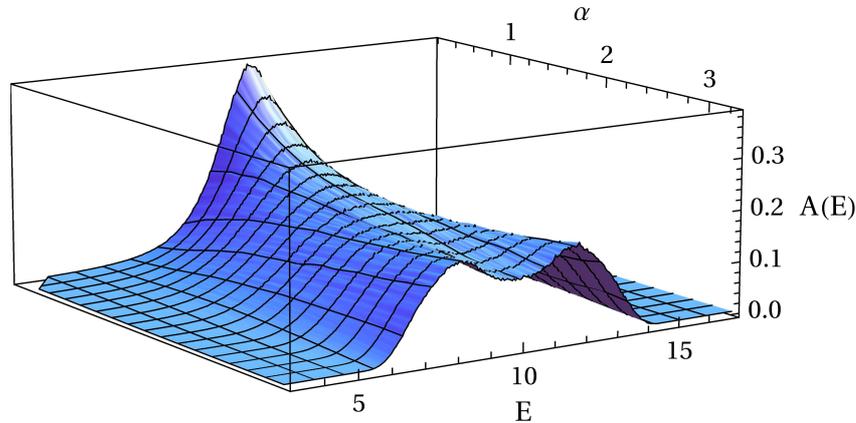


O gráfico 3.3 mostra a flutuação relativa da participação versus o grau de correlação para sistemas de diferentes tamanhos. Como podemos observar  $\eta$  decresce com o incremento de  $\alpha$ , o que evidencia o surgimento de estados delocalizados relacionado ao aumento da correlação de longo alcance na desordem do sistema, como já discutido anteriormente. Note ainda, que para  $\alpha < 2$  a flutuação apresenta um crescimento com o tamanho do sistema, essa é uma das características dos sistemas localizados, enquanto que para  $\alpha > 2$  o comportamento é contrário,  $\eta$  diminui quando  $N$  cresce. Este comportamento pode ser visto no *inset* da figura 3.3. Ainda no *inset* do gráfico observamos que as curvas da flutuação convergem para o mesmo ponto  $\alpha = 2$ , mostrando que nesse ponto ocorre uma transição do tipo localização-delocalização. Esse resultado está em concordância com a literatura que prevê o mesmo valor de transição para o modelo com desordem de longo alcance na energia on-site (10).

Para monitorar o ponto onde existe transição de Anderson calculamos a flutuação relativa da participação (35, 36, 51) para diferentes magnitudes da desordem. Os resultados estão apresentados no gráfico 3.4.

Os resultados apresentados até o presente momento foram obtidos para uma variância  $\Delta = 1$ , como foi dito no início do capítulo. Para estudar a dependência entre o ponto crítico e a quantidade de desordem repetimos os cálculos para  $\Delta = 0,5$  e  $\Delta = 0,75$  nas mesmas

Figura 3.5: Espectro de absorção para uma cadeia de 1000 sítios com diferentes graus de correlação. Observa-se que o incremento de  $\alpha$  aumenta a largura da banda de absorção até um  $\alpha_c$  onde a partir de então o espectro passa a ter dois picos (1).



Fonte: Autora, 2011.

condições já descritas e pudemos ver que a flutuação relativa da participação apresenta o mesmo comportamento encontrado para variância  $\Delta = 1$ , com todas as curvas convergindo no ponto crítico  $\alpha = 2$ . Portanto podemos concluir que o expoente crítico é universal e não depende da magnitude da desordem.

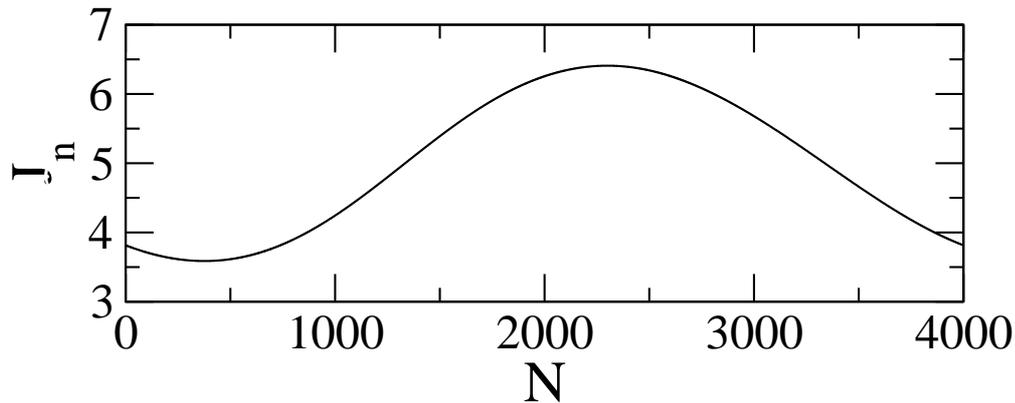
Portanto, podemos concluir que para um sistema unidimensional com desordem correlacionada de longo alcance na energia de hopping há presença de transição de Anderson em  $\alpha = 2$ . Tendo estados localizados para  $\alpha < 2.0$  e estados delocalizados para  $\alpha > 2.0$ . E que o ponto crítico  $\alpha = 2.0$  não depende da quantidade de desordem do sistema.

### 3.2.2 Espectro de Absorção

Ainda considerando o mesmo modelo descrito no início da seção, uma cadeia unidimensional com desordem de longo alcance fora da diagonal e na ausência de campo elétrico, buscamos saber qual o efeito dessa desordem sobre as propriedades ópticas do sistema. Para isso vamos utilizar as autofunções e as autoenergias calculadas numericamente por meio das equações 3.2 e 3.5 para obtermos o espectro de absorção  $A(E)$ , definido pela equação 3.12

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\beta} \delta(E - E_{\beta}) F_{\beta}, \quad (3.12)$$

Figura 3.6: Energia de *hopping* obtida a partir da equação 3.2 para forte correlação ( $\alpha \gg 2$ ). Note que a curva é semelhante a uma curva da função cosseno.



Fonte: Autora, 2011.

Onde  $F_\beta$  é a força de oscilação dada por:

$$F_\beta = \left[ \sum_n \psi(E_\beta)_n \right]^2. \quad (3.13)$$

As equações 3.12 e 3.13 foram resolvidas numericamente para um sistema com 1000 sítios, variância  $\Delta = 1$  e um número de realizações da ordem de  $10^4$  para diferentes graus de correlação. O resultado da influência de desordem correlacionada sobre a absorção do sistema pode ser visto no gráfico 3.5

O espectro de absorção visto no gráfico 3.5 nos mostra que quando o grau de correlação é  $\alpha < 2$  o espectro apresenta um único pico, usual para um sistema desordenado (41, 44). Entretanto, para  $\alpha > 2$  o espectro apresenta dois picos. Como discutimos na última seção do capítulo 2, a absorção de uma sistema depende de sua força de oscilador, que por sua vez está relacionada com a natureza dos autoestados eletrônicos. Estados localizados apresentam maior força de oscilador em relação a estados estendidos e portanto, contribuem mais para o espectro de absorção (44).

Observando o gráfico 3.5, é possível notar que a medida que aumentamos o grau de correlação, a largura da banda de absorção aumenta até um certo  $\alpha_c = 2$ . A partir desse valor a banda apresenta dois picos de absorção. A origem desses dois picos pode ser explicada a partir de cálculos heurísticos apresentados na referência (44) e descritos a seguir.

Sendo a desordem fora da diagonal dada pela equação 3.2, podemos considerá-la como

uma soma de harmônicos espaciais (note que a equação 3.2 é uma soma de cossenos), cujos termos possuem amplitudes iguais a  $C(\alpha)k^{\alpha/2}$  que decrescem com o aumento do número harmônico  $k$ . Desse modo, para grandes valores de  $\alpha$  (forte correlação) apenas o primeiro termo da série ( $k = 1$ ) é considerado e portanto, a energia de *hopping* pode ser representada por uma função, aproximadamente, tipo cosseno:

$$J_{n,n+1} \approx \cos(2\pi n + \phi_1). \quad (3.14)$$

Como pode ser visto na figura 3.1(d) e que está novamente reproduzida na figura 3.6:

Por conveniência, podemos desacoplar o sistema em dois subsistemas com  $N/2$  e  $1 + N/2$  sítios (representado na figura 3.7(a) pela linha pontilhada) e assumir que a energia de *hopping* descrita acima, a qual tem forma de sino (linha cheia), será uma função do tipo degrau (linha cheia vermelha), cujos valores são a média da função cosseno em cada subsistema representados por  $J^*$ .

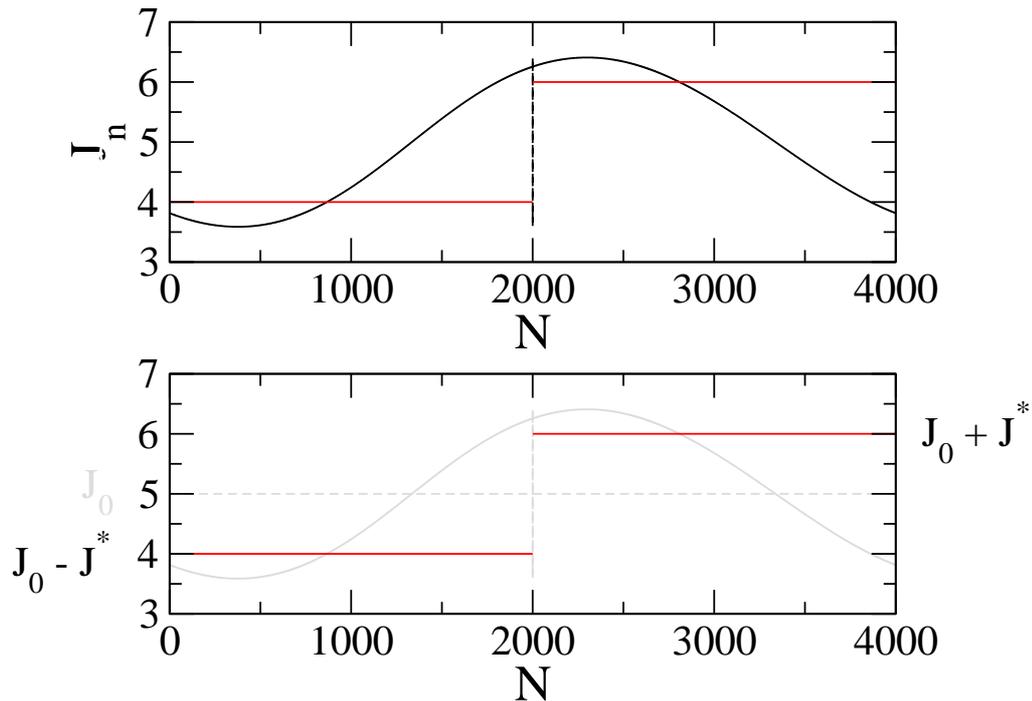
Como mostrado na seção 3.1, a energia de *hopping* média do sistema é dada por  $J_0$ . Deste modo as funções degrau possuem valores  $J_0 - J^*$  e  $J_0 + J^*$  como indicado na figura 3.7(b).

Por fim, temos que a energia de *hopping* para o subsistema  $n < N/2$  varia de  $-2(J_0 + J^*)$  até  $2(J_0 + J^*)$  e para  $n > N/2$  varia de  $-2(J_0 - J^*)$  até  $+2(J_0 - J^*)$ , como podemos ver no esquema apresentado pela figura 3.8.

Por meio da figura 3.8 é possível ver, claramente, a formação de duas bandas de energia. O topo de cada sub-banda representa os modos de maior força de oscilação do sistema. No modelo efetivo de duas sub-bandas apresentado, o topo de cada subbanda é dado por  $2(J_0 + J^*) \approx 12.0$  e o outro dado por  $2(J_0 - J^*) \approx 8.0$ . Estes valores concordam com os picos de absorção encontrados no gráfico 3.5.

A fim de entendermos a relação entre a força de oscilador e os picos do gráfico de absorção nós calibramos nosso programa de modo a obtermos as autofunções correspondentes aos autoestados cujas energias encontrassem nos picos de absorção e entre os picos, respectivamente. O resultado pode ser visto na figura 3.9. Os gráficos 3.9(a) e (c) mostram a função de onda correspondente aos autoestados de energia  $E = 8,51$  e  $E = 10,91$ , respectivamente.

Figura 3.7: Esquema que ilustra a origem dos dois picos no espectro de absorção óptica. Energia de *hopping* com forte correlação desacoplada em dois subsistemas de energias  $J_0 - J^*$  e  $J_0 + J^*$ , respectivamente.

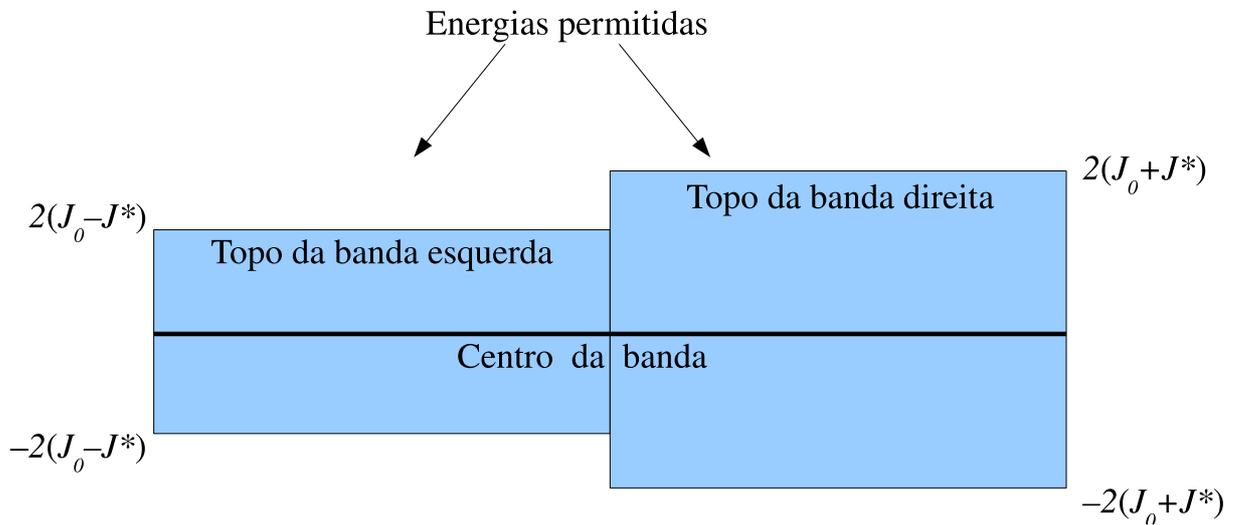


Fonte: Autora, 2011.

Note que essas energias são bem próximas das energias das bordas das sub-bandas visto na figura 3.8 e sua função é bem diferente da apresentada em (b) que corresponde a um autoestado entre os dois picos. Isso mostra que a força de oscilador das funções de onda em (a) e (c) é maior do que a função de onda em (b), o que confirma a afirmação de que funções de onda com força de oscilador maior contribuem mais para o espectro de absorção. A força de oscilador é calculada pela área sob a curva da função de onda.

Nessa primeira parte do capítulo, apresentamos o estudo de um sistema desordenado com correlação de longo alcance na energia de hopping e sem a presença de campo elétrico. Por meio da participação média e de sua flutuação mostramos a existência de transição de Anderson em sistema unidimensional, corroborando assim, com os resultados já presente na literatura. Além disso, apresentamos fortes indícios da existência de um ponto crítico universal ( $\alpha_c = 2$ ), onde ocorre a transição independente da quantidade de desordem. E por fim, ainda mostramos mais uma possibilidade de estudo desse tipo de transição feita por meio da análise das propriedades ópticas, especialmente a absorção. Mostramos que a absorção sofre uma mudança de comportamento a medida que aumentamos a correlação e apresentamos alguns indícios de como esse comportamento está ligado a natureza dos estados

Figura 3.8: Esquema que ilustra a origem dos dois picos do espectro de absorção, oriundos da presença de forte correlação da desordem. Os modos que representam o topo de cada sub-banda apresentam maior força de oscilação, respectivamente  $2(J_0 + J^*) \approx 12.0$  para a banda esquerda e  $2(J_0 - J^*) \approx 8.0$  para a banda direita. O modelo efetivo de duas sub-bandas explica qualitativamente e quantitativamente o espectro de absorção de dois picos.



Fonte: Autora, 2011.

eletrônicos. Na próxima seção seguiremos estudando a influência da correlação na desordem agora na presença de campo elétrico.

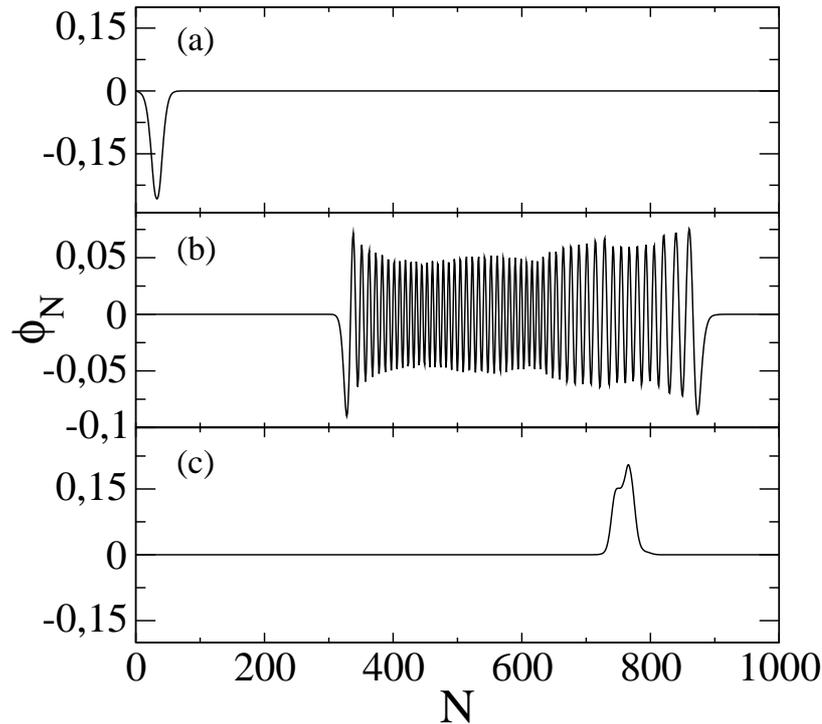
### 3.3 Campo Elétrico $T \neq 0$

Nessa seção estudamos a evolução temporal de um elétron em um sistema desordenado com correlação de longo alcance fora da diagonal (na energia de *hopping*) na presença de campo. Para isso vamos calcular a posição média do pacote de onda no decorrer do tempo utilizando o mesmo modelo descrito na seção 3.1.

#### 3.3.1 Dinâmica Eletrônica na Presença de Campo Elétrico

O primeiro passo para iniciarmos o cálculo da posição média do pacote de onda é escrever o Hamiltoniano do sistema, o qual é o mesmo dado pela equação 3.1, considerando o sistema

Figura 3.9: Gráficos da função de onda versus sítio para cadeia de 1000 sítios (a) para autoestado de energia  $E = 8,51$  (b) para autoestado de energia  $E = 9,57$  e (c) para autoestado de energia  $E = 10,91$ .



Fonte: Autora, 2011.

na presença de campo elétrico:

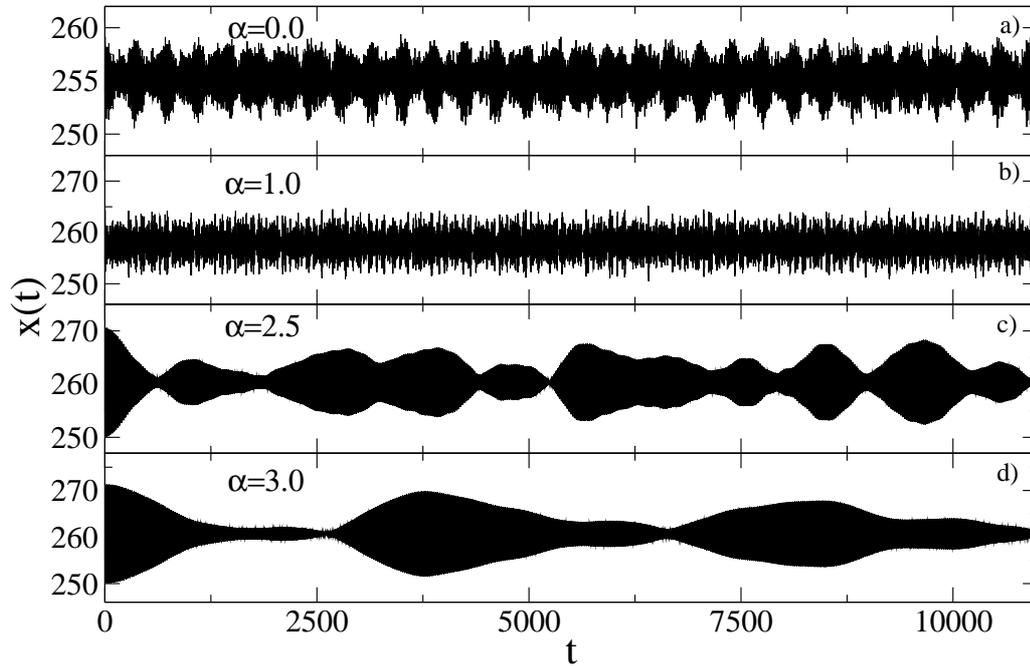
$$\mathbf{H} = \sum_n^N (-eTan) |n\rangle\langle n| + \sum_n^{N-1} J_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1|, \quad (3.15)$$

onde, como já foi descrito anteriormente,  $T$  é o campo elétrico uniforme,  $a$  é a constante de rede,  $e$  é a carga do elétron e  $J_{n,n+1}$  é a amplitude de hopping do sistema, que assim como para o caso sem campo elétrico, é escrito como o traço do movimento Browniano fracionário dado pela equação 3.2.

Nesse parte dos nossos estudos, estamos interessados em saber como o pacote de onda se comporta no decorrer do tempo, logo, vamos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo. A equação a ser resolvida numericamente, em termos das amplitudes de Wannier ( $c_n(t) = \langle n|\Psi(t)\rangle$ ), é a seguinte

$$i\dot{c}_n = -Fnc_n + J_{n,n+1}c_{n+1} + J_{n,n-1}c_{n-1}, \quad (3.16)$$

Figura 3.10: Posição média do pacote eletrônico  $x(t)$  versus  $t$  para uma sistema de 500 sítios sujeito a um campo elétrico uniforme  $F = 1,0$ . Para correlação forte  $\alpha > 2$  observamos um comportamento oscilatório da posição média. Este comportamento indica a presença de de oscilações de Bloch.



Fonte: Autora, 2011.

onde o tempo é expresso em unidades de  $\hbar/J_0$  e  $F$  é um parâmetro adimensional tal que  $F = eTa/J_0$ .

Assumimos um pacote de onda Gaussiano de largura  $\sigma$  centrado no sítio  $n_0$  dado por

$$c_n(t=0) = Z(\sigma) \exp \left[ -\frac{(n - n_0)^2}{4\sigma^2} \right], \quad (3.17)$$

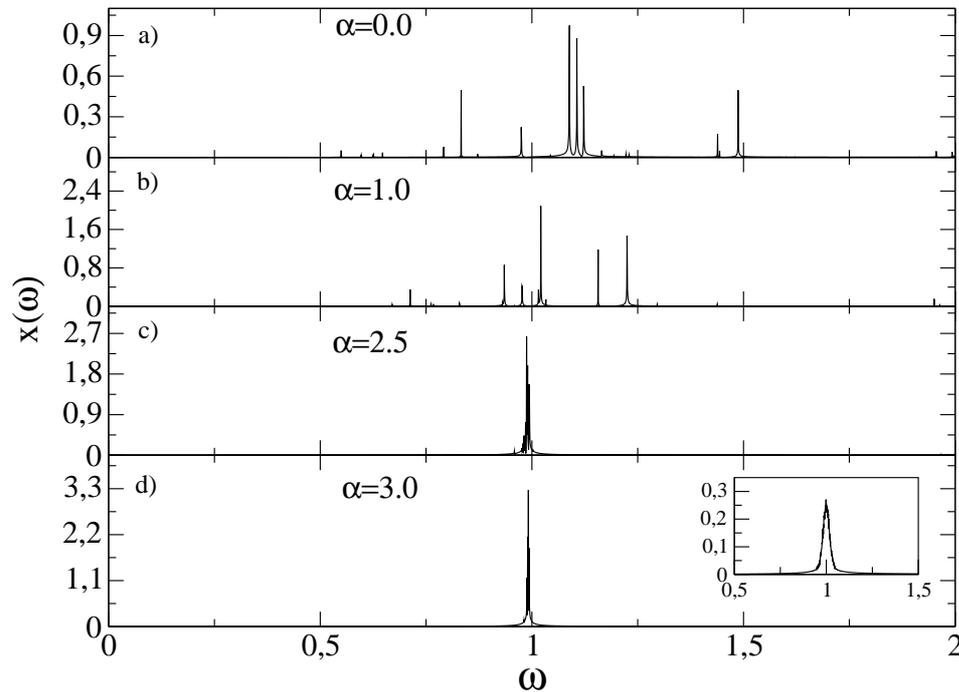
onde  $Z(\sigma)$  é uma constante de normalização.

Para então calculamos a posição média do pacote eletrônico  $x(t)$  na presença de campo elétrico utilizando a equação:

$$x(t) = \sum_n (n - n_0) |c_n(t)|^2. \quad (3.18)$$

A posição média do elétron para um sistema com correlações de longo alcance na distribuição da energia de *hopping* no decorrer do tempo e na presença de campo elétrico pode ser vista nos gráficos 3.10 e 3.11.

Figura 3.11: Transformada de Fourier  $x(\omega)$  versus  $\omega$ . Para correlação fraca (a) e (b) não existe uma frequência típica, portanto não ocorrem oscilações de Bloch. Para correlação forte (c) e (d) a frequência de oscilação é igual ao valor do campo caracterizando oscilação de Bloch (1).



Fonte: Autora, 2011.

Na seção 2.1.2 foi mostrado que em sistemas sem desordem, o campo elétrico uniforme é responsável por uma localização dinâmica do elétron, a qual origina um movimento oscilatório dentro da banda, na literatura chamado de oscilação de Bloch (3). No gráfico 3.10 mostramos a posição média do pacote eletrônico  $x(t)$  para um sistema de 500 sítios, sujeito a um campo constante  $F = 1,0$  com diversos graus de correlação. Observamos que para fraca correlação ( $\alpha < 2$ ), gráficos 3.10(a) e 3.10(b) não existe assinatura de oscilação de Bloch, enquanto que para  $\alpha > 2$ , gráficos 3.10(c) e 3.10(d) nota-se o seu surgimento. Esse comportamento corrobora com as nossas discussões anteriores de que o incremento da correlação possibilita o surgimento de estados estendidos e portanto, a existência de uma transição de Anderson.

Como discutido na seção 2.1.2 as oscilações de Bloch são caracterizadas pela existência de uma frequência característica do movimento oscilatório, a qual é igual ao valor do campo elétrico aplicado, como pode ser visto na equação 2.13 (sendo as constantes  $ea/\hbar = 1$ ). Portanto, para confirmar a existência das oscilações de Bloch mostradas no gráfico 3.10 tomamos a transformada de Fourier de  $x(t)$ . O resultado pode ser visto nos gráficos 3.11.

Nos gráficos 3.11(a) e 3.11(b) podemos observar que o elétron vibra com diferentes frequências, ou seja, não há uma frequência típica. Portanto, esse movimento oscilatório não caracteriza oscilações de Bloch. Note porém, que nos gráficos 3.11(c) e 3.11(d), onde a correlação da desordem é mais forte, existe apenas uma frequência de oscilação  $\omega = 1$ , a qual corresponde exatamente ao valor campo elétrico que foi aplicado ao sistema  $F = 1$ . Portanto para forte correlação da desordem o sistema descrito apresenta oscilações de Bloch.

# 4

## CONCLUSÃO

Nesse trabalho apresentamos os resultados do estudo dos efeitos da presença de correlação de longo alcance em uma cadeia unidimensional com desordem na energia de hopping sobre as propriedades de transporte eletrônico, propriedades ópticas e ainda no comportamento do sistema na presença de campo elétrico.

Para inserir correlação de longo alcance no hopping, nós consideramos esta energia como sendo uma função com densidade espectral do tipo  $S(k) \propto 1/k^\alpha$  (10) e resolvemos a equação de Schrödinger para cadeias de diferentes tamanhos. Com os autovalores calculamos a participação média do sistema e a flutuação da participação. Através desses parâmetros mostramos que, assim como no modelo de desordem nas energias de sítios, o aumento da correlação de longo alcance aqui também favorece a delocalização da função de onda e que uma transição localização-delocalização ocorre para um ponto crítico  $\alpha_c = 2$ , em total concordância com a literatura. Repetimos os nossos cálculos para diferentes intensidades de desordem ( $\Delta = 0.5$  e  $\Delta = 0.75$ ) e obtivemos os mesmos resultados, o que indica que esse ponto de transição é invariável em relação a esse parâmetro.

A fim de entender mais sobre os efeitos desse tipo de desordem, estudamos também qual a sua influência sobre as propriedades ópticas do sistema. Para isso, calculamos o espectro de absorção (44, 41) para uma cadeia de 1000 sítios com diferentes graus de correlação e mostramos que para correlação  $\alpha < 2$  o sistema apresenta um pico de absorção não simétrico, o esperado para sistemas desordenados sem correlação (41), no entanto para  $\alpha > 2$  o espectro

---

apresenta dois picos de absorção, resultado semelhante ao encontrado para correlação nas energias de sítio (44). Por meio de cálculos heurísticos demonstramos a origem desses dois picos. Esse resultado é interessante pois indica que essa propriedade também pode ser utilizada para detectar transição de Anderson.

Por fim estudamos qual a influência da desordem no hopping para um sistema de 500 sítios com um campo elétrico constante  $F = 1.0$ . Resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo para um pacote de onda inicialmente localizado e calculamos a posição média do pacote eletrônico no decorrer do tempo. Observamos que para fraca correlação na energia de hopping,  $\alpha < 2$ , o sistema não apresenta assinatura de oscilações de Bloch, ou seja, o campo aprisiona o pacote de onda sem uma oscilação coerente. Para  $\alpha > 2$  observamos um comportamento típico de oscilações de Bloch. Tomando a transformada de Fourier, pudemos comprovar que para fraca correlação não existe uma frequência predominante, enquanto que para forte correlação foi notada a existência de uma frequência típica no mesmo valor do campo elétrico aplicado, em plena concordância com a abordagem semiclássica. Essa constatação é importante pois permite determinar a largura da fase delocalizada desses sistemas.

Portanto nesta dissertação apresentamos uma análise detalhada sobre modelos unidimensionais com correlações de longo alcance nas amplitudes de Hopping. A transição metal-isolante induzida por correlações que foi observada para este modelo anteriormente (45) foi revisitada através de um formalismo numérico mais eficiente e robusto. Nossa análise possibilitou mostrar a universalidade do ponto de transição deste modelo bem como enfatizar a importância, nesta classe de sistemas, do uso de técnicas de absorção ópticas. Os principais resultados desta dissertação foram publicados na ref. (1). Dentro do atual contexto de localização em sistemas com desordem correlacionada vale salientar a importância da interação elétron-elétron, neste trabalho descartado. Portanto uma de nossas perspectivas consiste em estudar o efeito de termos de interação nas propriedades de transporte eletrônico aqui investigadas. Interessamos ainda, estudar o espectro de absorção óptico para sistemas com potencial não periódico

# REFERÊNCIAS

- 1 ASSUNCAO, T. F. et al. Coherent electronic dynamics and absorption spectra in an one-dimensional model with long-range correlated off-diagonal disorder. *Phys. Lett. A*, v. 375, p. 1048–1052, 2011.
- 2 SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA, S. *A Física no Brasil na próxima década: Física da Matéria Condensada*. São Paulo: Sociedade Brasileira de Física, 1990. Disponível em: <<http://www.sbfisica.org.br>>. Acesso em: 05/07/2011.
- 3 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. California: Saunders College, 1976.
- 4 VIDAL, E. J. G. G. *Dinâmica eletrônica em cadeias unidimensionais não lineares discretas, nos limites adiabático e não adiabático*. Dissertação (Mestrado) — UFAL, Maceio, 2010.
- 5 KITTEL, C. *Introdução a Física do Estado Sólido*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- 6 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958.
- 7 ABRAHAMS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, n. 10, p. 673 – 676, 1979.
- 8 DUNLAP, D. H.; WU, H.-L.; PHILLIPS, P. W. Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, n. 1, p. 88–91, 1990.
- 9 FLORES, J. C. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder. *J. Phys.: Condens. Matter I*, p. 8471–8479, 1989.

- 10 de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, n. 17, p. 3735–3738, 1998.
- 11 BLOCH, F. Über die quantenmechanik der electron in krestallgittern. *Zeitschrift fur Physik*, v. 52, p. 555–600, 1928.
- 12 ZAK, J. Dynamics of electrons in solids in external fields. *Phys. Rev.*, v. 168, n. 3, p. 686–695, 1968.
- 13 WANNIER, G. H. Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields. *Reviews of Modern Physics*, v. 34, n. 4, p. 645–655, 1962.
- 14 DIAS, W. da S. *Dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas e aperiódicas: Efeito de campo elétrico*. Dissertação (Mestrado) — UFAL, Maceió, 2007.
- 15 ZENER, C. A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics. *Proc. R. Soc. A*, v. 145, n. 855, p. 523–529, 1934.
- 16 LEO, K. Interband optical investigation of bloch oscillations in semiconductor superlattices. *Semicond. Sci. Technol.*, v. 13, p. 249–263, 1998.
- 17 ESAKI, L.; TSU, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J. Res. Dev.*, v. 14, p. 61–65, 1970.
- 18 DOMÍNGUEZ-ADAME, F. et al. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, n. 19, p. 197402–197405, Nov 2003.
- 19 LONGHI, S. Bloch oscillations in tight-binding lattices with defects. *Phys. Rev. B*, v. 81, n. 19, p. 195118–195123, May 2010.
- 20 MOTT, N. F. *Proc. Phys. Soc.*, A62, p. 416, 1949.
- 21 MOTT, N. F. Metal-insulator transition. *Reviews of Modern Physics*, v. 40, n. 4, p. 677–683, 1968.
- 22 ZALLEN, R. *The Physics of Amorphous Solids*. New York: A Wiley-Interscience, 1983.

- 23 THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, v. 13C, n. 93, p. 93–142, 1974.
- 24 de MOURA, F. A. B. F. *Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada*. Tese (Doutorado) — UFPE, Recife, 2003.
- 25 KRAMER, B. et al. Finite size scaling analysis of the anderson transition. *Int. J. of Mod. Phys. B*, v. 24, p. 1841–1854, 2010.
- 26 WU, H. L.; PHILLIPS, P. Polyaniline is a random-dimer model: a new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.*, v. 66, p. 1366–1369, 1991.
- 27 BOVIER, A. Perturbation theory for the random dimer model. *J. Phys. A*, v. 25, n. 5, p. 1021, 1992.
- 28 EVANGELOU, S. N.; KATSANOS, D. E. Super-diffusion in random chains with correlated. *Phys. Lett. A*, v. 164, p. 456–464, 1992.
- 29 LAVARDA, F. C. et al. Near resonant scattering from nonsymmetric dimers: Applications to substituted polyanilines. *Phys. Rev. Lett.*, v. 73, p. 1267–1270, 1994.
- 30 HEINRICHS, J. Localization, antilocalization, and delocalization in one-dimensional disordered lattices. *Phys. Rev. B*, v. 51, p. 5699–5710, 1995.
- 31 PACZUSKI, M.; MASLOV, S.; BAK, P. Avalanche dynamics in evolution, growth and depinning models. *Phys. Rev. E*, v. 53, p. 414–443, 1996.
- 32 PENG, C. K. et al. Long-range correlations in nucleotide sequencia. *Nature*, v. 356, p. 168–171, 1992.
- 33 FEDER, J. *Fractal*. 2. ed. New York: Plenum Press, 1988.
- 34 F.A.B.F. de Moura, B. S. L. V. M. L.; MOURA, F. de. Diffusive, super-diffusive and ballistic transport in the long-range correlated 1d anderson model. *Solid State Communications*, v. 138, p. 585195118, 2006.
- 35 dos SANTOS, I. F. et al. Critical behavior of the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder. *J. Phys.: Condens. Matter I*, v. 19, n. 476213, p. 1–9, 2007.

- 36 de MOURA, F. A. B. F.; DOMINGUEZ-ADAME, F. Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. *Eur. Phys. J. B*, v. 66, p. 165–169, 2008.
- 37 de MOURA, F. A. B. F. Absence of localization on the 2d model with long-range correlated off-diagonal disorder. *Eur. Phys. J. B*, v. 78, p. 335–339, 2010.
- 38 KUHL, U.; IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. Enhancement of localization in one-dimensional random potentials with long-range correlations. *Phys. Rev. Lett.*, v. 100, p. 126402–126405, 2008.
- 39 LUNA-ACOSTA, A. et al. One dimensional kronig-penney with positional disorder. theory versus experiment. *Phys. Rev. B*, v. 80, p. 115112–115115, 2009.
- 40 DIETZ, O. et al. Microwave realization of quasi-one-dimensional systems with correlated disorder. *Phys. Rev. B*, v. 83, p. 134203–134206, 2011.
- 41 FIDDER, H.; KNOESTER, J.; WIERSMA, D. A. Optical properties of disordered molecular aggregates: A numerical study. *J. Chem. Phys.*, v. 95, n. 11, p. 7880–7890, 1991.
- 42 HEIJS, D. J. *Optical dynamics in multichromophore systems*. Tese (Doutorado) — Rijksuniversiteit Groningen-RuG, 2006.
- 43 FRENKEL, J. On the transformation of light into heat in solids. ii. *Phys. Rev.*, v. 37, n. 17, p. 1276–1294, 1931.
- 44 DIAZ, E. et al. Anomalous optical absorption in a random system with scale-free disorder. *Europhys. Lett.*, v. 72, n. 6, p. 1018–1024, 2005.
- 45 de MOURA, F. A. B. F.; LYRA, M. L. Correlation-induced metal-insulator transition in the one-dimensional anderson model. *Physica A*, v. 266, p. 465–470, 1999.
- 46 PRESS, W. H. et al. *Numerical recipes: the art of scientific computing*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- 47 KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, v. 53, p. 1459–1564, 1993.

- 
- 48 de MOURA, F. A. B. et al. Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder. *Europhys. Lett.*, v. 66, n. 4, p. 585–591, 2004.
- 49 THEIDOROU, G.; COHEN, M. H. Extended states in a one-dimensional system with off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, v. 13, n. 10, Maio 1976.
- 50 CHERAGHCHI, H.; FAZELI, S. M.; ESFARJANI, K. Localization-delocalization transition in a one one-dimensional system with long-range correlated off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, v. 72, n. 174207, 2005.
- 51 MALYSHEV, A. V.; MALYSHEV, V. A.; DOMINGUEZ-ADAME, F. Monitoring the localization-delocalization transition within a one-dimensional model with nonrandom long-range interaction. *Phys. Rev. B*, v. 70, n. 172202, p. 1–4, 2004.

A

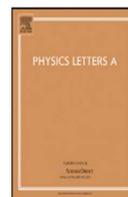
ARTIGO PUBLICADO



Contents lists available at ScienceDirect

Physics Letters A

www.elsevier.com/locate/pla



## Coherent electronic dynamics and absorption spectra in an one-dimensional model with long-range correlated off-diagonal disorder

T.F. Assunção<sup>a</sup>, M.L. Lyra<sup>a</sup>, F.A.B.F. de Moura<sup>a,\*</sup>, F. Domínguez-Adame<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió AL 57072-970, Brazil

<sup>b</sup> GISC, Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense, E-28040 Madrid, Spain

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 28 December 2010

Accepted 2 January 2011

Available online 5 January 2011

Communicated by V.M. Agranovich

#### Keywords:

Bloch-like oscillations

Correlated disorder

Extended state

### ABSTRACT

In this work we study an one-dimensional Anderson model with long-range correlated off-diagonal disorder. We numerically demonstrate the presence of extended states and an anomalous optical absorption spectrum for high degrees of correlation. We also show that the electric field biased electronic wave packet dynamics shows Bloch-like oscillations.

© 2011 Elsevier B.V. All rights reserved.

### 1. Introduction

Electronic transport in non-periodic lattices is a very relevant issue which has attracted the scientific interest during several decades. The scaling theory of Anderson localization predicts the absence of extended eigenstates in low-dimensional systems for any degree of uncorrelated disorder [1–3]. Therefore, electronic wave packets localize in a finite region around any given initial position. However, it has been shown that low-dimensional disordered systems can support extended states or a localization–delocalization transition in the presence of short or long-range correlations in the disorder distribution [4–17]. The absence of Anderson localization in the presence of spatial short-range correlations in disorder was theoretically pointed out by Flores [4] and Dunlap et al. [5] at the end of eighties and the experimental confirmation was obtained by Bellani and co-workers [12] in a semiconductor superlattice with intentional correlated disorder. It has been reported [7,10,11,14] that systems with long-range correlated diagonal disorder display an Anderson metal–insulator transition with mobility edges separating localized and extended states for sufficiently strong correlations. Furthermore, the one-dimensional (1D) model with long-range off-diagonal disorder was investigated in Ref. [16]. It was demonstrated that a localization–delocalization transition occurs similar to that in 1D model with correlated diagonal disorder. The effect of long-range correlated scatters on the transport properties of microwave guides was ex-

perimentally studied and corroborated the predicted presence of mobility edges [15]. Furthermore, the theoretical prediction that is possible to see Anderson localization in a random multilayered filter [18] opened a wide field to investigate the effects of correlated disorder in optical systems. Random dielectric multilayers can be mapped on the problem of one electron in a random media with close connections with the random dimers and off-diagonal disorder versions of the Anderson model [19].

A key problem in condensed matter physics is to understand the electronic transport when disorder and electric field effects are simultaneously present. The interplay between disorder and dynamical localization due to an electric field was recently studied in Refs. [20,21]. It was numerically shown that coherent Bloch oscillations can appear whenever the disorder distribution displays appropriated long-range correlations in both one- [20] and two-dimensional [21] systems. This finding opens the possibility to perform experiments on coherent dc charge transport for measuring the bandwidth of the delocalized phase in disordered systems with long-range correlated randomness. Moreover, it is well known that optical spectroscopy usually fails in detecting localization–delocalization transitions. However, in Ref. [22] it was numerically reported an anomalous behavior of the absorption spectrum in an 1D lattice with long-range correlated diagonal disorder. The double-peak absorption spectrum found is the unique spectroscopic tool to monitor the Anderson transition.

In this Letter we will contribute to advance the understanding of electronic transport in low-dimensional systems with correlated disorder distribution. We will study an 1D Anderson model with long-range correlated off-diagonal disorder, generated by an 1D discrete Fourier method. The participation number and its scaling

\* Corresponding author. Tel.: +55 82 3214 1429; fax: +55 82 3214 1645.  
E-mail address: fidelis@if.ufal.br (F.A.B.F. de Moura).

behavior will be obtained through direct diagonalization. The scaling analysis of the mean participation number around the band center will be used to identify the presence of extended states for high degrees of correlation and to explore the possible dependence of the transition point on the strength of disorder. We will also numerically investigate the signature of the delocalization–localization transition on the optical absorption spectrum. In addition we will consider the electric field biased dynamics of an initially localized wave packet by numerically solving the 1D time-dependent Schrödinger equation. Associated with extended states for high degrees of correlation, we will show that sustainable Bloch-like oscillations emerge with a dominant frequency given by the semi-classical prediction.

## 2. Model and formalism

We consider a tight-binding Hamiltonian with long-range correlated off-diagonal disorder under an external dc electric field on a regular 1D open lattice of spacing  $a$  [16]

$$H = \sum_{n=1}^N (-e\mathcal{F}an)|n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N-1} J_{n,n+1}|n\rangle\langle n+1|, \quad (1)$$

where  $|n\rangle$  is a Wannier state localized at site  $n$  with zero site energy,  $\mathcal{F}$  is an external uniform electric field, and  $N$  is even. The intersite coupling is restricted to nearest-neighbors and assumed to be nonuniform over the entire lattice with  $J_{n,n+1} = J_n$ . The source of disorder is the stochastic fluctuations of intersite coupling  $J_n$ , which we are going to consider as being long-range correlated. One of the simplest ways to numerically generate a long-range correlated sequence of on-site potentials  $J_n$  is to write its Fourier decomposition as follows [24]

$$J_n = C_\alpha(N) \sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right). \quad (2)$$

Here,  $\phi_k$  are  $N/2$  independent random phases uniformly distributed within the interval  $[0, 2\pi]$ , and  $C_\alpha$  is a normalization constant. We will displace the hopping sequence to have  $\langle J_n \rangle = J_0 = 5$  and choose  $C_\alpha$  to keep the variance size independent ( $\sqrt{\langle J_n^2 \rangle} - \langle J_n \rangle = \Delta$ ). The long-range nature of the potential correlations results from the power-law dependence of the amplitudes on the wave-vector characterizing each Fourier component. Several stochastic processes in nature are known to generate long-range correlated random sequences which have no characteristic scale as, for example, in the nucleotide sequence of DNA molecules [25]. The relevance of the underlying long-range correlations for the electronic transport in DNA has been recently discussed in Ref. [26]. Furthermore, interface roughness appearing during growth often displays height–height correlations with power-law spectra [27]; thus, the subsequent random potential arising from the rough interface would be long-range correlated. Recently, transport properties of systems with long-range correlated disorder was explored, both theoretically and experimentally, in the design of devices for filtering of electrical and optical signals [28].

### 2.1. Magnitudes of interest

Initially we will consider the model in the absence of an electric field ( $\mathcal{F} = 0$ ). In order to study the localization properties we compute the static participation ratio defined by  $P(E) = \sum_{n=1}^N \psi_n^2(E) / \sum_{n=1}^N \psi_n^4(E)$ . Here  $\psi_n(E)$  are the Wannier amplitude associated with an eigen-energy  $E$ , ( $|\phi(E)\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n(E)|n\rangle$ ) in a chain of  $N$  sites. The eigenmodes are obtained by direct diagonalization of the Hamiltonian  $H$ .  $P(E)$  diverges proportional to

the number of sites for extended states, but remains finite for exponentially localized ones. We average  $P(E)$  in a small window around  $E = 0$ :

$$\langle \xi \rangle = \left[ \sum_{E=-\Delta E/2}^{\Delta E/2} P(E) \right] / N_E. \quad (3)$$

We use  $\Delta E \approx 1.0$  and a large number of samples such that the number of eigenmodes in each window ( $N_E$ ) is close to  $10^6$  in order to obtain a good statistical accuracy. The sun avoids the band center ( $-0.1 < E < 0.1$ ). Here, we will be particularly interested in computing the fluctuation of the participation number defined by

$$\Delta \xi = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle} - \langle \xi \rangle, \quad (4)$$

where  $\langle \xi^2 \rangle$  is the squared participation number averaged in the same energy window as in Eq. (3). The relative fluctuation of the participation number is given by

$$\eta = \Delta \xi / \langle \xi \rangle. \quad (5)$$

Within the framework of random and non-random long-range hopping models, it was demonstrated rigorously that the distribution function of the participation function is scale invariant at the Anderson transition [29]. Such scale invariance has been used to monitor the critical point of long-range hopping models [30] and shall also holds for general models exhibiting a localization–delocalization transition [31–33]. For extended states, the relative fluctuation  $\eta(E)$  vanishes continuously with increasing system sizes since the participation function  $\xi(E)$  diverges linearly while the fluctuation  $\Delta \xi(E)$  has a weaker size dependence resulting from self-averaging. In the opposite regime of exponentially localized states, the relative fluctuation grows with increasing system size converging to a finite value. The relative fluctuation thus converges to a step function as  $N \rightarrow \infty$ , with a discontinuity at the mobility edge. Therefore, when plotting the relative fluctuation as a function of  $\alpha$ , the curves obtained from different chain sizes shall cross roughly at a single point, identifying the localization–delocalization transition. In addition we will study the absorption spectrum defined as

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\beta} \delta(E - E_{\beta}) F_{\beta}, \quad (6)$$

where  $F_{\beta}$  is the oscillator strength associated with the eigenvalue  $\beta$ , namely  $F_{\beta} = [\sum_n \psi_n(E_{\beta})]^2$ . When  $J_n > 0$  and disorder is uncorrelated, the eigenstates with higher oscillator strength are those at the top of the band.

### 2.2. Electric field effects

In terms of the Wannier amplitudes  $\psi_n(t) = \langle n | \Psi(t) \rangle$ , the Schrödinger equation reads [20]

$$i\dot{\psi}_n = -Fn\psi_n + J_{n+1}\psi_{n+1} + J_n\psi_{n-1} \quad (7)$$

where we introduced the dimensionless parameter  $F = e\mathcal{F}a/J_0$ , and time is expressed in units of  $\hbar/J_0$ . After the introduction of the disorder in the off-diagonal terms, we solve numerically Eq. (7) to study the time evolution of an initially Gaussian wave packet of width  $\sigma$  centered at site  $n_0$

$$\psi_n(t=0) = Z(\sigma) \exp\left[-\frac{(n-n_0)^2}{4\sigma^2}\right] \quad (8)$$

where  $Z(\sigma)$  is a normalization constant. Once Eq. (7) is solved for the initial condition (8), we compute the mean position of the wave packet (centroid)

behavior will be obtained through direct diagonalization. The scaling analysis of the mean participation number around the band center will be used to identify the presence of extended states for high degrees of correlation and to explore the possible dependence of the transition point on the strength of disorder. We will also numerically investigate the signature of the delocalization–localization transition on the optical absorption spectrum. In addition we will consider the electric field biased dynamics of an initially localized wave packet by numerically solving the 1D time-dependent Schrödinger equation. Associated with extended states for high degrees of correlation, we will show that sustainable Bloch-like oscillations emerge with a dominant frequency given by the semi-classical prediction.

## 2. Model and formalism

We consider a tight-binding Hamiltonian with long-range correlated off-diagonal disorder under an external dc electric field on a regular 1D open lattice of spacing  $a$  [16]

$$H = \sum_{n=1}^N (-e\mathcal{F}an)|n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N-1} J_{n,n+1}|n\rangle\langle n+1|, \quad (1)$$

where  $|n\rangle$  is a Wannier state localized at site  $n$  with zero site energy,  $\mathcal{F}$  is an external uniform electric field, and  $N$  is even. The intersite coupling is restricted to nearest-neighbors and assumed to be nonuniform over the entire lattice with  $J_{n,n+1} = J_n$ . The source of disorder is the stochastic fluctuations of intersite coupling  $J_n$ , which we are going to consider as being long-range correlated. One of the simplest ways to numerically generate a long-range correlated sequence of on-site potentials  $J_n$  is to write its Fourier decomposition as follows [24]

$$J_n = C_\alpha(N) \sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right). \quad (2)$$

Here,  $\phi_k$  are  $N/2$  independent random phases uniformly distributed within the interval  $[0, 2\pi]$ , and  $C_\alpha$  is a normalization constant. We will displace the hopping sequence to have  $\langle J_n \rangle = J_0 = 5$  and choose  $C_\alpha$  to keep the variance size independent ( $\sqrt{\langle J_n^2 \rangle} - \langle J_n \rangle = \Delta$ ). The long-range nature of the potential correlations results from the power-law dependence of the amplitudes on the wave-vector characterizing each Fourier component. Several stochastic processes in nature are known to generate long-range correlated random sequences which have no characteristic scale as, for example, in the nucleotide sequence of DNA molecules [25]. The relevance of the underlying long-range correlations for the electronic transport in DNA has been recently discussed in Ref. [26]. Furthermore, interface roughness appearing during growth often displays height–height correlations with power-law spectra [27]; thus, the subsequent random potential arising from the rough interface would be long-range correlated. Recently, transport properties of systems with long-range correlated disorder was explored, both theoretically and experimentally, in the design of devices for filtering of electrical and optical signals [28].

### 2.1. Magnitudes of interest

Initially we will consider the model in the absence of an electric field ( $\mathcal{F} = 0$ ). In order to study the localization properties we compute the static participation ratio defined by  $P(E) = \sum_{n=1}^N \psi_n^2(E) / \sum_{n=1}^N \psi_n^4(E)$ . Here  $\psi_n(E)$  are the Wannier amplitude associated with an eigen-energy  $E$ , ( $|\phi(E)\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n(E)|n\rangle$ ) in a chain of  $N$  sites. The eigenmodes are obtained by direct diagonalization of the Hamiltonian  $H$ .  $P(E)$  diverges proportional to

the number of sites for extended states, but remains finite for exponentially localized ones. We average  $P(E)$  in a small window around  $E = 0$ :

$$\langle \xi \rangle = \left[ \sum_{E=-\Delta E/2}^{\Delta E/2} P(E) \right] / N_E. \quad (3)$$

We use  $\Delta E \approx 1.0$  and a large number of samples such that the number of eigenmodes in each window ( $N_E$ ) is close to  $10^6$  in order to obtain a good statistical accuracy. The sun avoids the band center ( $-0.1 < E < 0.1$ ). Here, we will be particularly interested in computing the fluctuation of the participation number defined by

$$\Delta \xi = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2}, \quad (4)$$

where  $\langle \xi^2 \rangle$  is the squared participation number averaged in the same energy window as in Eq. (3). The relative fluctuation of the participation number is given by

$$\eta = \Delta \xi / \langle \xi \rangle. \quad (5)$$

Within the framework of random and non-random long-range hopping models, it was demonstrated rigorously that the distribution function of the participation function is scale invariant at the Anderson transition [29]. Such scale invariance has been used to monitor the critical point of long-range hopping models [30] and shall also holds for general models exhibiting a localization–delocalization transition [31–33]. For extended states, the relative fluctuation  $\eta(E)$  vanishes continuously with increasing system sizes since the participation function  $\xi(E)$  diverges linearly while the fluctuation  $\Delta \xi(E)$  has a weaker size dependence resulting from self-averaging. In the opposite regime of exponentially localized states, the relative fluctuation grows with increasing system size converging to a finite value. The relative fluctuation thus converges to a step function as  $N \rightarrow \infty$ , with a discontinuity at the mobility edge. Therefore, when plotting the relative fluctuation as a function of  $\alpha$ , the curves obtained from different chain sizes shall cross roughly at a single point, identifying the localization–delocalization transition. In addition we will study the absorption spectrum defined as

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\beta} \delta(E - E_{\beta}) F_{\beta}, \quad (6)$$

where  $F_{\beta}$  is the oscillator strength associated with the eigenvalue  $\beta$ , namely  $F_{\beta} = [\sum_n \psi_n(E_{\beta})]^2$ . When  $J_n > 0$  and disorder is uncorrelated, the eigenstates with higher oscillator strength are those at the top of the band.

### 2.2. Electric field effects

In terms of the Wannier amplitudes  $\psi_n(t) = \langle n | \Psi(t) \rangle$ , the Schrödinger equation reads [20]

$$i\dot{\psi}_n = -F n \psi_n + J_{n+1} \psi_{n+1} + J_n \psi_{n-1} \quad (7)$$

where we introduced the dimensionless parameter  $F = e\mathcal{F}a/J_0$ , and time is expressed in units of  $\hbar/J_0$ . After the introduction of the disorder in the off-diagonal terms, we solve numerically Eq. (7) to study the time evolution of an initially Gaussian wave packet of width  $\sigma$  centered at site  $n_0$

$$\psi_n(t=0) = Z(\sigma) \exp\left[-\frac{(n-n_0)^2}{4\sigma^2}\right] \quad (8)$$

where  $Z(\sigma)$  is a normalization constant. Once Eq. (7) is solved for the initial condition (8), we compute the mean position of the wave packet (centroid)

$$x(t) = \sum_n (n - n_0) |\psi_n(t)|^2. \quad (9)$$

### 3. Results

#### 3.1. Localization and absorption spectrum at zero bias

We start analyzing the results for the participation number and its fluctuations. We have considered  $\Delta = 1$  in Fig. 1. In Fig. 1(a) we plot the mean participation number  $\langle \xi \rangle$  versus  $N$  for  $\alpha = 1.1$  up to 2. We observe clearly that  $\langle \xi \rangle$  increases when  $\alpha$  is increased. This feature agrees with the expected result concerning the emergence of extended states in long-range correlated disordered chains. For  $\alpha > 2$  the participation number diverges linearly with the system size, indicating extended states. This result supports previous findings shown in Ref. [16]. However, it is interesting to note that for  $1 < \alpha < 2$  the participation number also increase as the system size is increased. It was numerically proposed that this regime does not support true extended states [16]. However, the Lyapunov exponent derived from the transfer matrix formalism is vanishingly small in this intermediate regime [23]. The fluctuations of the participation number can be used as a precise tool to monitor the Anderson localization transitions [30–33]. In Fig. 1(c) we plot the relative fluctuation of the participation number  $\Delta \xi$  versus the degree of correlation  $\alpha$  for  $N = 500$  up to 8000 sites. We observe that the curves obtained from different chain sizes cross roughly at a single point identifying the critical spectral exponent around  $\alpha = 2$ . A small dispersion at the crossing point is usually due to small corrections to scaling that are present in numerical calculations on finite systems. Before concluding the localization study, some words concerning the critical value  $\alpha_c = 2$ . In Ref. [14], it was numerically shown that in 1D electronic system with long-range correlated diagonal disorder, the critical spectral exponent  $\alpha_c$  is rather independent on the magnitude of disorder  $\Delta$ . In Fig. 2(a)–(b) we show the scaling behavior of the relative fluctuation on the participation number for  $\Delta = 0.5$  and  $\Delta = 0.75$ . We can see that the critical spectral exponent is also universal, does not depending on the magnitude of the off-diagonal disorder.

Now we focus our attention to the absorption spectrum  $A(E)$  for the present 1D model with off-diagonal correlated disorder. To solve numerically Eq. (6) we used  $N = 1000$  sites,  $\Delta = 1$  and  $10^4$  realizations of disorder for each value of  $\alpha$ . Fig. 3 shows the output of these calculations. We observe that for  $\alpha < 1$  the absorption spectrum displays a single and asymmetric peak slightly above the higher band edge  $E = 10$  of the periodic lattice ( $\sigma = 0$ ), i.e., only the highest states of the band contribute to the absorption spectrum. Therefore, we have the same trend observed in 1D systems with uncorrelated diagonal disorder. For  $1 < \alpha < 2$  we observe an increase of the absorption bandwidth. Thus, models with weak long-range correlations in off-diagonal disorder have a stronger localization at the band edges as compared to the uncorrelated case, as it also occurs in the case of diagonal weakly correlated disorder [22]. However, for  $\alpha > 2$  the absorption spectrum displays a well-defined doublet. One of the doublet components (at high energy) is located at the top of the band as usual, whereas the other one (at lower energy) lies deep inside the band. In contrast to the case of  $\alpha < 2$ , the broadening of the peaks drops down on increasing  $\alpha$  and then saturates. To explain the origin of such doublet peak structure, we will follow Ref. [22] and present a simplified model that contains the basic ingredients needed to obtain the absorption spectrum. The heuristic calculation is started by considering the off-diagonal disorder given by Eq. (2). It is a sum of spatial harmonics. The amplitude of each term,  $C_\alpha k^{-\alpha/2}$ , decreases upon increasing the number  $k$ . For sufficient large  $\alpha$ , the first term in the series (2) will be dominant. Therefore, the hopping distribution for a given realization represents a harmonic function of

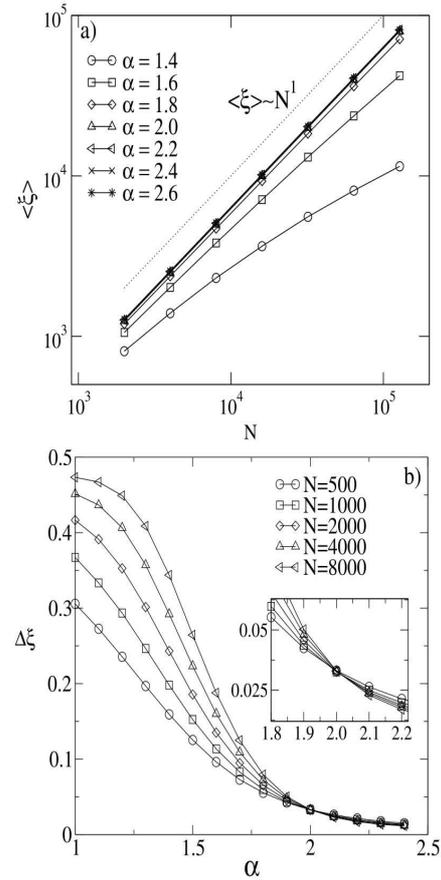


Fig. 1. (a) Mean participation number  $\langle \xi \rangle$  versus  $N$  for  $\alpha = 1.1$  up to 2. We clearly observe that for  $\alpha > 2$  the participation number diverges linearly with the system size indicating extended states. (b) The relative fluctuation of the participation number  $\Delta \xi$  versus the spectral exponent  $\alpha$  for  $N = 500$  up to 8000 sites. Curves obtained from different chain sizes crosses roughly at a single point  $\alpha = 2$ . A small spread of the crossing point is usually due to small corrections to scaling that are present in numerical calculations on finite systems (see inset).

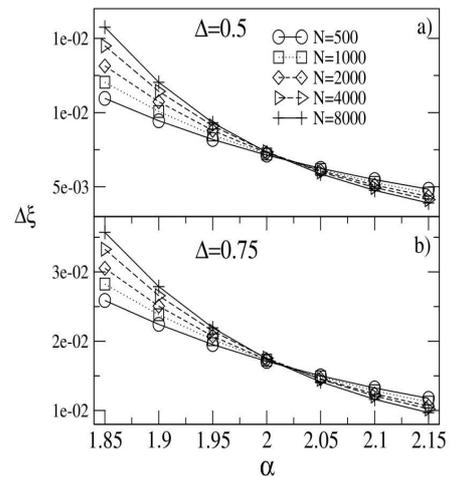
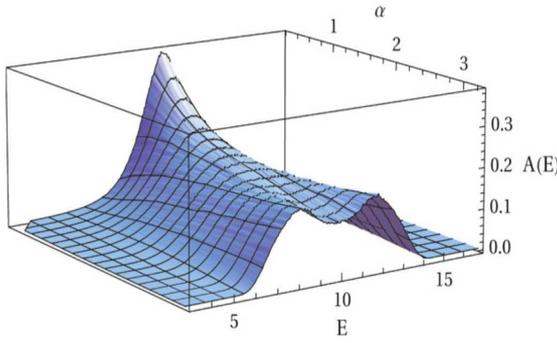
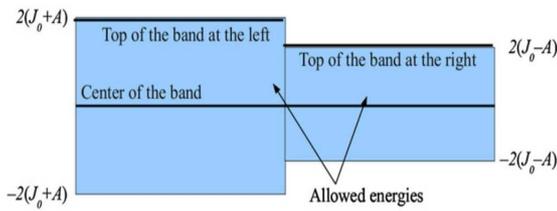


Fig. 2. Relative fluctuation of the participation number, averaged over an energy window  $-1 < E < 1$ , versus  $\alpha$  for  $\Delta = 0.5$  and 0.75. Similarly to models with long-range correlated diagonal disorder [14], the model with off-diagonal correlated disorder also displays a critical point ( $\alpha_c$ ) that does not depend on the magnitude of disorder  $\Delta$ .

period  $N$ , perturbed by a colored harmonic noise. To further simplify the model, we can divide the 1D lattice in two chains with  $J_n \approx J_0 + J^*$  for  $n < N/2$  and  $J_n \approx J_0 - J^*$  for  $n > N/2$  where  $J^* = (2/\pi)C_\alpha$  is the average value of the effective harmonic hop-



**Fig. 3.** Absorption spectrum  $A(E)$  versus energy and  $\alpha$ . Numerical calculations of Eq. (6) were done using  $N = 1000$  sites,  $\Delta = 1$  and  $10^4$  realizations of the disorder for each value of  $\alpha$ . We observe that for  $\alpha < 1$  the absorption spectrum displays a single and asymmetric peak slightly above the higher band edge  $E = 10$  of the periodic lattice ( $\alpha = 0$ ), i.e., only the highest states of the band contribute to the absorption spectrum. For  $1 < \alpha < 2$  we observe an increase of the absorption bandwidth. For  $\alpha > 2$  the absorption spectrum displays a well-defined doublet.

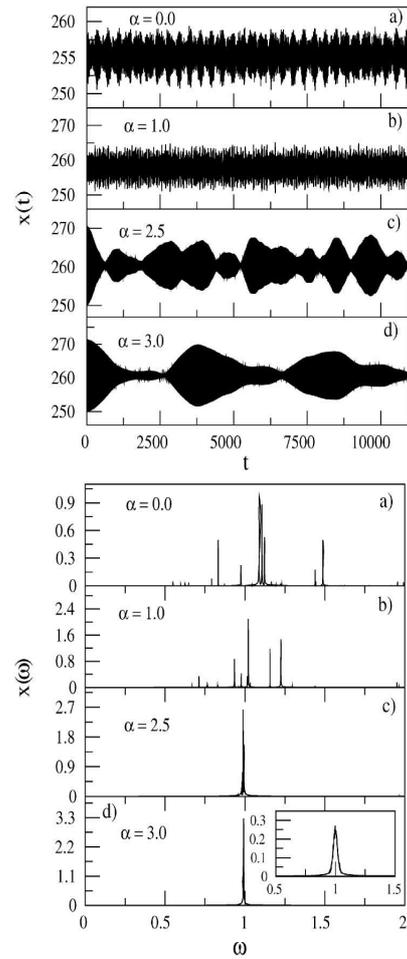


**Fig. 4.** The 1D model with strong long-range correlated off-diagonal disorder can be mapped into a chain with  $J_n \approx J_0 + J^*$  for  $n < N/2$  and  $J_n \approx J_0 - J^*$  for  $n > N/2$  where  $J^* = (2/\pi)C_\alpha$  is the average value of the effective harmonic hopping distribution on the left half [Eq. (2)]. The band of allowed energies of each sublattice is showed, ranging from  $-2(J_0 + J^*)$  to  $+2(J_0 + J^*)$  and from  $-2(J_0 - J^*)$  to  $+2(J_0 - J^*)$  at the left and right sublattices, respectively. For this effective band distribution we expect an absorption spectrum with two peaks caused by the transitions from the ground state to the uppermost state of each subband. For  $\Delta = 1$  their locations are  $2(J_0 + J^*) \approx 12.0(1)$  and  $2(J_0 - J^*) \approx 8.0(1)$ , in good agreement with Fig. 3.

ping distribution on the left half. Therefore, we map the original lattice onto two uniform sublattices, coupled to each other through the hopping between sites  $N/2$  and  $N/2 + 1$ . The allowed energies of each sublattice form a band, ranging from  $-2(J_0 + J^*)$  to  $+2(J_0 + J^*)$  and from  $-2(J_0 - J^*)$  to  $+2(J_0 - J^*)$  for the left and right sublattices, respectively (see Fig. 4). The absorption spectrum of such a system is expected to have two peaks caused by the transitions from the ground state to the top state of each subband. For  $\Delta = 1$  their locations are  $2(J_0 + J^*) \approx 12.0(1)$  and  $+2(J_0 - J^*) \approx 8.0(1)$ . We stress that these values are in good agreement with the numerical calculations presented in Fig. 3.

### 3.2. Electric field effects

Finally, we study the time evolution of an initially localized wave packet subjected to a uniform electric field. It is well known that in disorder-free systems, a uniform electric field causes the dynamic localization of the electron and gives rise to an oscillatory motion of the wave packet, the so-called Bloch oscillations [20]. The size of the segment over which the electron oscillates and the period of the oscillations are estimated from semi-classical arguments to be  $L_F = W/F$  and  $\tau_B = 2\pi/F$ , respectively, where  $W$  is the width of the Bloch band in units of the coupling integral  $J_0$ . First, we compute the centroid  $x(t)$  in a chain with weak long-range correlated off-diagonal disorder ( $\alpha < 2$ ) of size  $N = 1000$  with  $F = 1.0$ . As deduced from the upper panel of Fig. 5(a)–(b), there is no signature of Bloch oscillations in this case. Regular oscillations, which are present immediately after the initial wave packet is released, are quickly damped (not shown). The subse-



**Fig. 5.** Centroid  $x(t)$  and its Fourier spectrum (upper and lower panels respectively) computed using a chain with  $N = 1000$  sites, electric field  $F = 1.0$  and several degrees of correlations  $\alpha = 0, 1, 2.5$  and  $3$ . We observe that the oscillations have no predominant frequency for  $\alpha < 2$ . However, in the regime of  $\alpha > 2$ , a coherent oscillatory motion of the centroid sets up, with a well-defined peak at the Bloch frequency.

quent motion of the centroid resembles a stochastic motion around some mean position. The Fourier spectrum  $x(\omega)$  of the centroid, plotted in the lower panel of Fig. 5(a)–(b), confirms this observation. The absence of a single peak in the Fourier spectrum  $x(\omega)$  suggests that for  $\alpha < 2$  the system shows a behavior similar to the standard Anderson model, with no signatures of Bloch oscillations. In the strong correlated case ( $\alpha > 2$ ), the centroid reveals an oscillatory amplitude-modulated pattern, as shown in Fig. 5 (upper and lower panels c and d). Its Fourier transform  $x(\omega)$  shows a well-defined narrow peak around  $\omega = F$ , as predicted by the semiclassical approximation [20].

### 4. Summary

In this Letter we study some aspects of localization, absorption spectrum and the biased electric field dynamics in an 1D Anderson model with long-range correlated off-diagonal disorder. The participation number and its scaling behavior were obtained through direct diagonalization. The scaling analysis of the relative fluctuations on the mean participation number around the band center indicates the presence of extended states for high degree of correlation and reveals that the critical spectral exponent does not depend of the disorder strength. We also numerically demonstrated that the delocalization–localization transition reveals itself in the optical absorption spectrum. The emergence of delocalized

states is signaled by the development of a well-defined doublet. One of the doublet components is located at the top of the band as usual, whereas the other one lies deep inside the band. By using a heuristic model we explain in detail the origin of the double peak absorption spectrum. In addition, the numerical calculations of the electric field biased dynamics of an initially localized wave packet have shown that, associated with extended states, sustainable Bloch-like oscillations sets up with the frequency obeying a semi-classical prediction.

### Acknowledgements

This work was partially financed by the Brazilian Research Agencies CAPES (PROCAD, Rede NanoBioestruturas), CNPq (INCT-Nano(Bio)Simes, Project No. 573925/2008-9) and FAPERJ/CNPq (Pronex). Work at Madrid was supported by MEC (projects MO-SAICO and MAT2010-17180). FABF de Moura thanks the hospitality of UCM.

### References

- [1] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* 109 (1958) 1492.
- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 673.
- [3] B. Kramer, A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56 (1993) 1469.
- [4] J.C. Flores, *J. Phys. Condens. Matter* 1 (1989) 8471.
- [5] D.H. Dunlap, H.L. Wu, P.W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 88; H.-L. Wu, P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 1366.
- [6] F. Domínguez-Adame, E. Maciá, A. Sánchez, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 6054.
- [7] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 3735.
- [8] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* 66 (2002) 014418.
- [9] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 012202.
- [10] F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 4062; F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, S.E. Ulloa, *Phys. Rev. B* 63 (2001) 41102.
- [11] G.P. Zhang, S.-J. Xiong, *Eur. Phys. J. B* 29 (2002) 491.
- [12] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2159.
- [13] V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, *Physica E* 7 (2000) 823.
- [14] H. Shima, T. Nomura, T. Nakayama, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 075116.
- [15] U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. Krokhin, H.J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 633.
- [16] H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 174207.
- [17] G. Schubert, A. Wei, *Physica B* 801 (2005) 359.
- [18] M. Hilke, *Phys. Rev. A* 80 (2009) 063820; A. Crisanti, *J. Phys. A* 23 (1990) 5235.
- [19] E.M. Nascimento, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 115120.
- [20] F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 197402.
- [21] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007) 056204.
- [22] E. Díaz, A. Rodríguez, F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, *Europhys. Lett.* 72 (2005) 1018.
- [23] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Physica A* 266 (1999) 465.
- [24] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 3735.
- [25] C.-K. Peng, S.V. Buldyrev, A.L. Goldberger, S. Havlin, F. Sciortino, M. Simons, H.E. Stanley, *Nature* 356 (1992) 168.
- [26] P. Carpena, P. Bernaola-Galván, P.Ch. Ivanov, H.E. Stanley, *Nature* 418 (2002) 955.
- [27] A.-L. Barabási, H.E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [28] A. Krokhin, F. Izrailev, U. Kuhl, H.-J. Stöckmann, S.E. Ulloa, *Physica E* 13 (2002) 695.
- [29] F. Evers, A.D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 3690; F. Evers, A.D. Mirlin, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 7920.
- [30] A.V. Malyshev, V.A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 172202.
- [31] I.F. dos Santos, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, M.D. Coutinho-Filho, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007) 476213.
- [32] F.A.B.F. de Moura, F. Domínguez-Adame, *Eur. Phys. J. B* 66 (2008) 165.
- [33] F.A.B.F. de Moura, *Eur. Phys. J. B* 78 (2010) 335.