

**O Papel da Desordem Local e  
da Interferência Quântica  
na Localização de Estados  
Eletrônicos**

Denise Fernandes de Mello ✓

Orientador: Dr. Guillermo Cabrera

*Este exemplar corresponde à redação  
final da Tese de Doutorado defendida  
pela aluna Denise Fernandes de Mello  
e aprovada pela Comissão Julgadora*

*Campinas, 06 de outubro de 1995*

*Guillermo Cabrera*

Tese apresentada ao Instituto de Física 'Gleb Wataghin'  
da Universidade Estadual de Campinas como parte dos  
requisitos à obtenção do título de Doutor em Ciências  
- Setembro de 1995

**PARECER DE APROVAÇÃO**  
**DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DE**  
***DENISE FERNANDES DE MELLO***

DATA: 21 / 09 / 95

BANCA EXAMINADORA:

- Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún (Orientador)



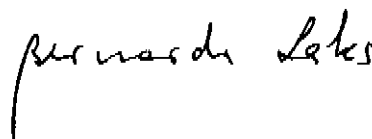
- Prof. Dr. David Gottlieb Banner



- Prof. Dr. Norberto Majlis



- Prof. Dr. Bernardo Laks



- Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz



*A meus pais João e Maria Helena*

## Agradecimentos

Ao Professor Guillermo Cabrera,  
pelo carinho e competência com que orientou este trabalho.  
A Unesp, CNPq, Capes, Faep e Fundação VITAE pelo apoio financeiro.

## Resumo

Desenvolvemos um novo método para o cálculo da Densidade de Estados eletrônicos (DOS) de Ligas Binárias Desordenadas. O método proposto permite a introdução de efeitos de ordem de curto alcance (SRO) e da presença de campo magnético. A estrutura da DOS é utilizada para analisar efeitos de localização dos estados eletrônicos. Nossos resultados mostram que os efeitos de SRO têm um papel essencial na localização dos estados eletrônicos. Obtivemos evidências da presença de estados eletrônicos não exponencialmente localizados para o caso bidimensional. O campo magnético aplicado induz mudanças na DOS que mostra um comportamento oscilatório de deslocalização-localização, quando o sistema está próximo do regime de localização fraca.

## Abstract

We have developed a new method to calculate the electronic Density of States (DOS) of disordered binary alloys. The method proposed permits to introduce effects of Short Range Order (SRO) and of an applied magnetic field. The structure of the DOS is used to analyse localization effects of the electronic states. We found that SRO effects plays an essential role in the localization of the electronic states. We obtained evidences of the presence of non-exponentially localized electronic states for the two-dimensional case. The applied magnetic field induces changes in the DOS which shows an oscillatory behaviour of delocalization-localization, when the system approaches to the weak localization regime.

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>Conteúdo</b>	<b>vi</b>
<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Apresentação Geral de Sistemas Desordenados</b>	<b>8</b>
1.1 Classificação de Sistemas Desordenados . . . . .	8
1.2 Efeitos de Ordem de Curto Alcance . . . . .	10
1.3 Caracterização dos Estados Eletrônicos . . . . .	11
1.4 Efeitos de Interações versus Localização . . . . .	14
1.5 Modelos . . . . .	19
1.5.1 Modelo de Anderson . . . . .	19
1.5.2 O Modelo da Liga Binária e o “Quantum Site (Bond) Percola- tion Model” . . . . .	20

1.6	Métodos . . . . .	21
1.7	Dados Experimentais . . . . .	23
<b>2</b>	<b>Um Novo Método de Cálculo da DOS de Sistemas Desordenados</b>	<b>25</b>
2.1	Sistemas Bidimensionais . . . . .	25
2.1.1	Caso Puro . . . . .	30
2.1.2	Desordem Aleatória . . . . .	34
2.2	Sistemas Tridimensionais . . . . .	40
2.2.1	Rede Cúbica - Caso Puro . . . . .	41
<b>3</b>	<b>Efeitos da Ordem de Curto Alcance na Localização dos Estados Eletrônicos de Sistemas Bidimensionais</b>	<b>45</b>
3.1	Caso Desordenado . . . . .	60
3.1.1	Aproximação de Kikuchi de Quadrados . . . . .	60
	<b>Conclusões</b>	<b>92</b>
<b>A</b>	<b>Método NFC ("Negative Factor Counting")</b>	<b>94</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>96</b>



# Introdução

Embora sistemas cristalinos venham sendo largamente estudados desde o início do século com o advento da Mecânica Quântica, e grandes progressos realizados nesse campo, sistemas condensados reais apresentam em geral algum grau de desordem, podendo variar, desde a presença de apenas algumas impurezas (ou defeitos) na rede cristalina, até o limite fortemente desordenado de estruturas vítreas ou semicondutores amorfos por exemplo.

Por outro lado, a última década tem sido caracterizada por um rápido desenvolvimento da ciência de materiais, com ênfase no crescimento de novos materiais com distintas propriedades e aplicações na indústria de microeletrônica. Super-redes metálicas e semicondutoras, supercondutores de alta temperatura crítica, camadas magnéticas (magnetic overlayers) em substratos magnéticos e não magnéticos, são exemplos de sistemas que apresentam em geral algum grau de desordem.

A presença de inhomogeneidade composicional e/ou estrutural faz com que o estudo de sistemas desordenados do ponto de vista teórico, seja ainda hoje um desafio. A perda da simetria translacional faz com que ferramentas como o Teorema de Bloch e a Teoria de Grupos, usadas para sistemas cristalinos, deixem de ser aplicáveis. Neste contexto outros métodos vem sendo buscados para a caracterização dos estados

eletrônicos.

Saber que processos físicos a nível microscópico são responsáveis pelas propriedades observadas é essencial.

Dentro do problema da desordem, uma das questões fundamentais que se levanta é a respeito da localização dos estados eletrônicos. A transição de estados localizados para estados estendidos em função da desordem do sistema está intimamente ligada do ponto de vista macroscópico com a transição metal-isolante (Transição de Anderson).

Elétrons que ocupam estados exponencialmente localizados estão restritos a regiões finitas do espaço, não contribuindo para as propriedades de transporte a  $T = 0$  K, se o acoplamento com outros graus de liberdade está sendo desconsiderado (como por exemplo interação elétron-fônon, elétron-elétron). Por outro lado elétrons em estados estendidos podem estar em qualquer parte e contribuem para o transporte. Como consequência, se o nível de Fermi está numa região de estados localizados, o sistema será um isolante, no sentido que a  $T = 0$  K, a condutividade DC ( $\sigma_C$ ) desaparece. Se, por sua vez o nível de Fermi está numa região de estados estendidos  $\sigma_C \neq 0$ .

A questão de como fica a localização na presença de desordem em função da dimensão do sistema vem sendo amplamente discutida desde o conhecido trabalho de Anderson [1] e mais recentemente com a Teoria de Scaling [2].

Durante muito tempo, foi considerada como absoluta a hipótese de Mott [3] de que todos os estados eletrônicos em 1 dimensão eram exponencialmente localizados, qualquer que fosse a desordem. Hoje, no entanto, alguns resultados [4, 5], mostram que é possível ter estados estendidos em 1 dimensão para alguns tipos de desordem.

Para o modelo de Anderson em particular, onde a desordem é do tipo aleatória e diagonal, permanece válido que todos os estados são localizados em 1 dimensão.

Com relação a dimensão dois, a controvérsia persiste. A Hipótese de Scaling de 1 parâmetro [2] afirma que para  $d=2$ , todos os estados são localizados. Alguns resultados existentes na literatura confirmam esta hipótese [15, 16, 20], embora por outro lado existam resultados que indicam uma possível transição de estados exponencialmente localizados para estados fracamente localizados [21, 22]. Na presença de interações, tipo elétron-elétron ou a presença de um campo externo, há indicações de que não necessariamente todos os estados sejam exponencialmente localizados [11, 62, 49]. Em 3 dimensões, existe um “mobility edge” (um valor crítico de energia) que separa estados localizados de estados estendidos [10, 3].

Sabe-se, por exemplo, que a presença de apenas algumas impurezas num semicondutor cristalino leva ao aparecimento de estados localizados isolados no gap, que decaem exponencialmente desde o centro da impureza. A medida que a concentração dessas impurezas (ou defeitos) vai aumentando, os estados eletrônicos vão sendo alterados significativamente, e a visão de impurezas isoladas se torna inadequada.

Estudar o papel da desordem na localização eletrônica é ponto relevante em fenômenos como Supercondutores de Alta Temperatura Crítica e Efeito Hall Quântico.

No caso de supercondutores de alta temperatura crítica, a desordem está presente nos planos de óxido de cobre. A variação de átomos de oxigênio é a responsável pela desordem, podendo neste caso induzir efeitos de localização dos estados eletrônicos

em conjunto com outros mecanismos.

Outro caso de interesse corresponde ao Efeito Hall Quântico Inteiro. Na ausência de desordem, a presença do campo magnético, entre outros efeitos, leva ao aparecimento dos conhecidos níveis de Landau, infinitamente degenerados, denominados “Hall plateaus”. Em geral considera-se que os “Hall plateaus” sejam um gas de elétrons bidimensional, onde a interação elétron-elétron, e os graus de liberdade de spin não são considerados. A presença de desordem, faz com que haja um alargamento dos plateaus, devido a quebra da degenerescência dos níveis de Landau. No limite em que esse alargamento é menor que a separação entre os próprios plateaus, os modelos “tight-binding” de uma única banda são extremamente úteis para estudar efeitos de localização eletrônica nos níveis mais baixos [13].

Para caracterizar se os estados eletrônicos são estendidos ou exponencialmente localizados, a Densidade de Estados Eletrônicos (DOS) pode ser considerada como o ponto inicial. De uma maneira geral estados estendidos dão à DOS uma estrutura suave e aproximadamente contínua, estados localizados dão uma DOS composta de estrutura de picos [32]. Os métodos de cálculo da DOS existentes dão em geral uma estrutura pobre, que não permite uma análise do ponto de vista da localização dos estados eletrônicos. Outras quantidades como comprimento de localização e probabilidade de transmissão são também usadas para estudar o comportamento dos estados eletrônicos.

Um fator importante e que não tem sido levado em conta nos trabalhos existentes na literatura quando se estuda a localização dos estados eletrônicos, é o efeito da or-

dem de curto alcance (SRO). Em sistemas desordenados reais, a tendência dos átomos não é de se distribuírem aleatoriamente, mas sim de apresentarem uma preferência na distribuição destes, devido a presença de interações interatômicas [17].

Nossa proposta neste trabalho foi investigar o papel da desordem local e da presença do campo magnético na localização dos estados eletrônicos a partir da densidade de estados eletrônicos (DOS). Nesse sentido desenvolvemos um novo método de cálculo da DOS, na qual a estrutura é obtida com detalhes que possam levar a uma indicação sobre a localização dos estados eletrônicos [6]. Nossos resultados mostram que o método proposto para o cálculo da DOS é extremamente eficiente e fornece uma estrutura detalhada e realística da DOS. Observamos pela primeira vez que Efeitos de Ordem de Curto Alcance (SRO) tem papel fundamental na localização dos estados eletrônicos em sistemas em 2 e 3 dimensões. Em duas dimensões, próximo ao limite de segregação das espécies, obtivemos evidências da presença de estados não exponencialmente localizados [6]. Mostramos também que o efeito do campo magnético aplicado a sistemas quase unidimensionais, depende fortemente do grau de ordem de curto alcance apresentado por este [7]. Quando o sistema tende a segregar-se, o campo introduz um efeito oscilatório de deslocalização-localização dos estados eletrônicos.

No capítulo 1 apresentamos a classificação geral de sistemas desordenados, os modelos existentes para descrever estes sistemas e os métodos usados para o estudo de propriedades eletrônicas.

No capítulo 2 propomos um novo método para calcular a Densidade de Estados

eletrônicos (DOS) para o Sistema no limite bi-dimensional. A DOS do sistema bi-dimensional ( e tridimensional) é obtida em função da DOS de cadeias lineares, o que simplifica muito o problema, visto que a DOS de sistemas unidimensionais pode ser obtida de maneira precisa e eficiente numericamente. Calculamos a DOS para os casos da rede quadrada e da rede cúbica puras [43, 6] . Estudamos também o caso de uma liga binária desordenada aleatória. Para os casos puros nosso método é exato. Para o caso bidimensional da desordem aleatória, nossos resultam indicam a presença de estados exponencialmente localizados [6] como relatado em outros trabalhos da literatura que estudam comprimento de localização [15, 20].

No capítulo 3 introduzimos Efeitos de Ordem de Curto Alcance (SRO). Resultados são apresentados indo desde o limite ordenado até o limite segregado. Discutimos o efeito da SRO na localização dos estados eletrônicos. Para concentrações iguais, os resultados obtidos da DOS, indicam a presença de estados não exponencialmente localizados quando o sistema está próximo do limite segregado, enquanto que quando o sistema está próximo à ordem, estados fortemente localizados são os característicos.

No capítulo 4 fazemos a extensão do método desenvolvido no capítulo 2 para sistemas quasi unidimensionais com a geometria de “barras”, e introduzimos a presença do campo magnético. O efeito do Campo magnético aplicado é introduzido como uma fase complexa na integral de de “hopping”. Discutimos qual seu efeito na localização dos estados eletrônicos em função das correlações de curto alcance. Temos evidências de que o efeito do campo magnético na localização eletrônica depende fortemente do grau de correlação, sendo mais fortes esses no limite de localização fraca.

No capítulo 5 apresentamos as conclusões .

## Capítulo 1

# Apresentação Geral de Sistemas Desordenados

### 1.1 Classificação de Sistemas Desordenados

Quando deixa de existir ordem de longo alcance (LRO) na distribuição dos átomos, os sistemas são em geral denominados sistemas desordenados.

Estes sistemas são classificados em função dos desvios que apresentam em relação a um sistema cristalino perfeito. Duas classes são em geral usadas para essa classificação, dependendo do grau de desordem apresentado em relação ao cristal ideal.

**Desordem Substitucional (ou Composicional):** Corresponde ao limite de mais fraca desordem. As posições ocupadas pelos átomos ainda formam uma estrutura periódica, como no caso cristalino, embora a distribuição dos átomos nessa estrutura seja desordenada. Esse tipo de desordem é em geral o apresentado por Ligas Intermetálicas, em particular as Ligas Binárias, onde apenas duas espécies atômicas estão presentes. A liga de Cu-Au, onde os átomos de Cu e Au são de tamanhos similares, exemplifica um caso de desordem substitucional, onde a substituição de um tipo



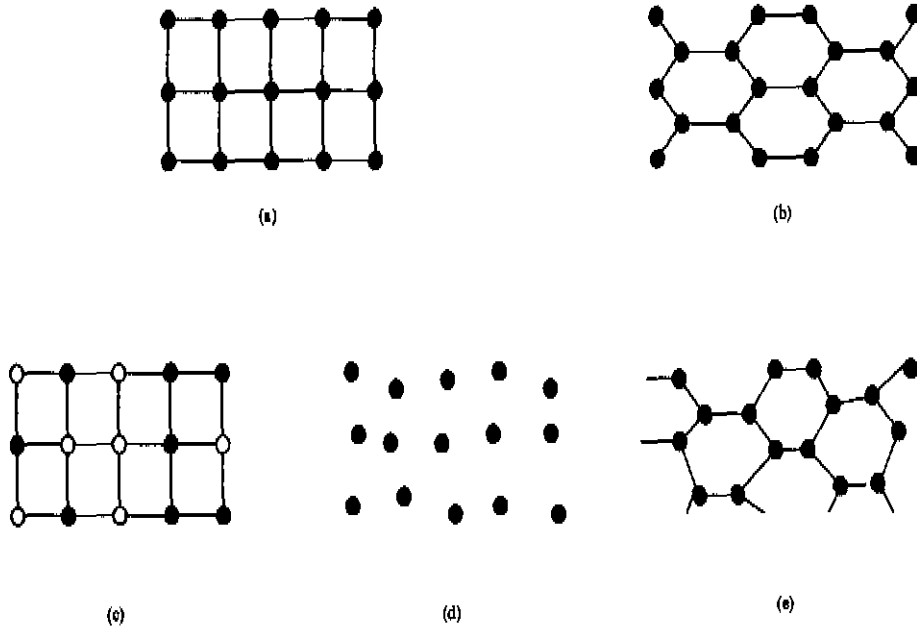


Fig. 1.1: Tipos de Desordem, (a) estrutura cristalina geral, (b) estrutura cristalina com ligações covalentes, (c) desordem substitucional, (d) desordem estrutural, (e) desordem apresentada pelos semicondutores amorfos (estrutural)

de átomo por outro ocorre sem criar alterações estruturais na rede. Outros exemplos de ligas são: Cu-Ni, Pd-V, Ni-Fe. Cristais mistos, como NaCl-KCl e semicondutores dopados tipo Si:P, Si:As também apresentam desordem do tipo substitucional.

**Desordem Estrutural (ou Topológica):** Corresponde ao grau mais alto de desordem. Nesse caso, já não existe vestígios de uma estrutura periódica. Esta terminologia em geral é utilizada para descrever tanto a desordem apresentada por metais líquidos, vidros, quanto os semicondutores amorfos. Neste último caso não existe também a ordem de longo alcance na distribuição atômica, mas se diz que uma certa ordem de curto alcance, é mantida na medida que o número de coordenação de cada átomo permanece o mesmo que no caso do cristal.

## 1.2 Efeitos de Ordem de Curto Alcance

A maneira como os átomos se distribuem não é completamente aleatória, mas depende da natureza dos átomos que ocupam sítios vizinhos. Sabe-se por exemplo que as energias efetivas de ligação interatômica não são usualmente a mesma para uma ligação entre átomos tipo  $A$  e para átomos tipo  $A$  e  $B$  ou  $B$  e  $B$ . Embora a hipótese de independência estatística na distribuição das espécies atômicas, onde a probabilidade de um sítio  $i$  ser ocupado por uma determinada espécie é simplesmente dada por sua concentração, seja a mais simples, ela é muito pouco realística. Correlações entre átomos em sítios vizinhos são importantes, ou seja, o sistema apresenta algum grau de ordem de curto alcance (SRO).

O efeito de ordem de curto alcance numa aproximação de primeiros vizinhos, pode ser definido em função da probabilidade de ocorrer uma ligação tipo  $AB$ ,  $p_{AB}$ :

$$p_{AB} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{2N_{AB}}{zN} \right) \quad (1.1)$$

onde  $N$  = número de sítios,  $N_{AB}$  = número de ligações  $AB$  e  $z$  = número de coordenação.

No caso de uma distribuição independente dos átomos nos sítios da rede, a probabilidade de ocorrer uma ligação  $AB$  seria simplesmente  $c_A c_B$ , onde  $c_i$  corresponde as concentrações.

O parâmetro de correlação entre primeiros vizinhos pode ser definido como:

$$\Gamma_{AB} = \frac{p_{AB}}{2} - c_A c_B \quad (1.2)$$

Na literatura várias definições são encontradas. Aqui usamos o Parâmetro de

Cowley  $\sigma_C$  [23] definido como :

$$\sigma_C = \frac{\Gamma_{AB}}{-c_{ACB}} \quad (1.3)$$

ou

$$\sigma_C = 1 - \frac{P_{AB}}{2c_{ACB}}, \quad (1.4)$$

with  $P_{AB} = p_{AB} + p_{BA}$ .

Se considerarmos o caso de uma liga binária com concentrações iguais das espécies A e B, variando o parâmetro  $\sigma_C$ , podemos ir desde o limite da ordem completa ( $\sigma_C = -1$ ), passando pela desordem aleatória ( $\sigma_C = 0$ ), até atingir o limite segregado ( $\sigma_C = 1$ ) [35].

O efeito de ordem não está necessariamente restrito a primeiros vizinhos, e pode ser considerado através de outras aproximações [23], como discutimos no capítulo 4, onde introduzimos correlações de quadrados, para a geometria de uma faixa [34].

### 1.3 Caracterização dos Estados Eletrônicos

Um elétron movendo-se num potencial aleatório, pode ter tanto estados estendidos quanto estados localizados. Classicamente podemos fazer a distinção entre estados estendidos e estados localizados apenas em função da energia do elétron com relação ao potencial a que este está sujeito. Olhando para a figura 1.2 fica fácil ver que se a energia do elétron  $E$  for maior que  $E_0$ , ele poderá se mover em todo espaço, ou seja, teremos um estado estendido. Se por outro lado o elétron tiver energia  $E$  menor que  $E_0$  ( $E_1$ ), ele estará confinado a intervalos finitos:  $(x_1, x_2)$ ,  $(x_3, x_4)$ , etc.

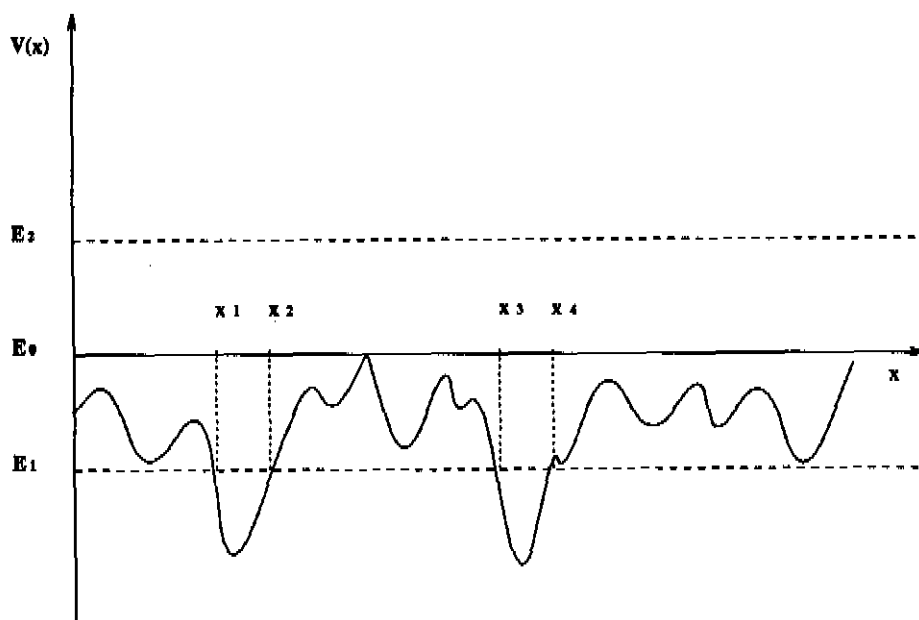


Fig. 1.2: Potencial aleatório

Distinguir o carácter do estado de uma partícula do ponto de vista da Mecânica Quântica é bastante mais complicado, pois de um lado temos o Efeito de Tunelamento, que permite o elétron tunelar através das barreiras de potencial, promovendo assim um efeito de deslocalização. Um exemplo clássico de deslocalização são os estados de Bloch num cristal. Por outro lado, temos os efeitos de interferência Quântica, podendo levar à localização do elétron para  $E > E_0$ , devido a superposição destrutiva dos estados eletrônicos.

O comportamento assintótico de um estado localizado é usualmente descrito por um decaimento exponencial da função de onda, expressa pela equação:

$$\Psi(x) = e^{-x/\xi} \quad (1.5)$$

onde  $\xi$  é o comprimento de localização, e  $\xi \rightarrow \infty$  corresponde ao limite de um estado

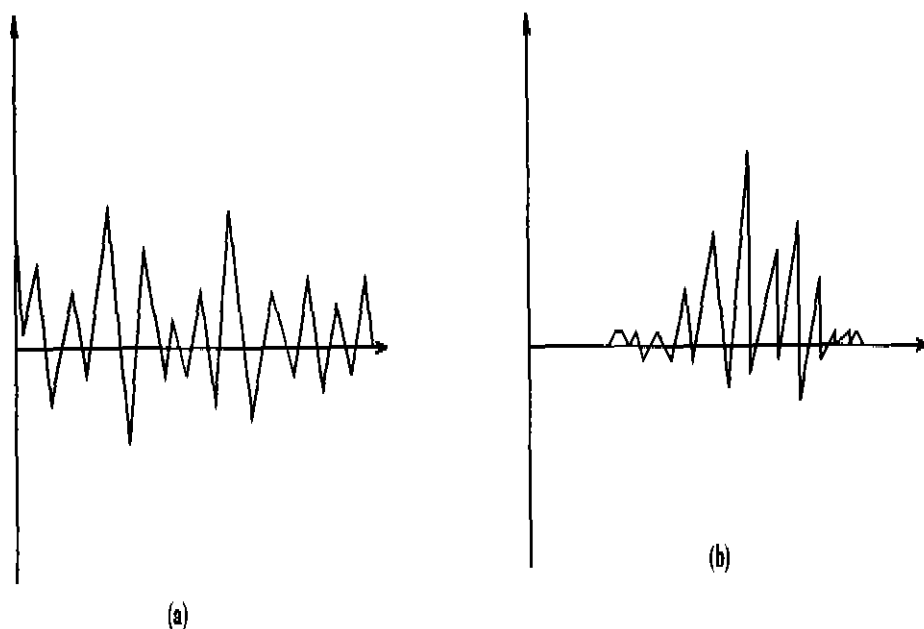


Fig. 1.3: (a) estado estendido, (b) estado localizado

estendido.

A diferença básica entre estados estendidos e estados localizados do ponto de vista da teoria de transporte, é que no primeiro caso é possível transportar corrente diretamente, enquanto que no segundo caso, o transporte de corrente só ocorre com a ajuda de outros mecanismos, como interação elétron-fônon. Assim, a condutividade residual é esperada ser nula para energia de Fermi numa região de estados localizados, e diferente de zero para uma região de estados estendidos. Essa transição do comportamento isolante para metálico é chamada Transição de Anderson, distinta da transição de Hubbard-Mott, que está diretamente ligada com a interação Coulombiana de curto alcance.

Das quantidades físicas estudadas para caracterizar se o estado é do tipo estendido ou localizado a mais simples corresponde a Densidade de Estados eletrônicos (DOS),

definida por:

$$n(E) = \frac{1}{\Omega} \sum \delta(E - E_i). \quad (1.6)$$

De maneira geral para estados estendidos a DOS é dada por uma curva suave, enquanto que para estados localizados a DOS aparece como uma coleção de picos [32]. Outra diferença básica nos espectros de sistemas cristalinos e sistemas desordenados, é que no primeiro caso, devido a ordem de longo alcance, tem-se a ocorrência das singularidades de Van Hove, enquanto que no segundo caso não [44].

Outra quantidade também estudada na caracterização dos estados eletrônicos é o comprimento de localização, obtido a partir dos elementos não diagonais da função de Green [32]. (Para a DOS necessitamos apenas dos elementos diagonais [43]).

## 1.4 Efeitos de Interações versus Localização

As propriedades de transporte dependem fortemente da característica dos estados eletrônicos do sistema. Enquanto num sistema com estados estendidos, a condutividade a  $T = 0$ , é diferente de zero, (onde o processo de condução pode ser considerado como sendo de difusão quântica), num sistema com estados localizados, a condutividade a  $T = 0$  é nula (e o mecanismo de condução acontece por "hopping" dos elétrons entre estados localizados em geral por ativação térmica, ou seja interação elétron-fônon, o que significa que a condutividade tem uma forte dependência com a temperatura nesse caso).

A teoria clássica de transporte, prevê uma condutividade independente da tem-

peratura, dada pelo modelo de Drude:

$$\sigma = \frac{nc^2}{m\tau_0}, \quad (1.7)$$

onde  $\tau_0$  é o tempo entre duas colisões e  $n$  o número de elétrons. Este resultado não leva em consideração a interferência quântica entre as funções de onda espalhadas. Medidas da resistividade em amostras metálicas com pequena concentração de impurezas, mostram que há um aumento logarítmico da resistividade com o decréscimo da temperatura. Esse limite é em geral conhecido como Regime de Localização Fraca. De outro lado, temos o caso característico de semicondutores dopados, onde a resistividade tem uma dependência exponencial com a temperatura [45], conhecido como Regime de Localização Forte (conhecido também como Regime de Hopping Variável). Outra maneira de definir esses dois regimes é em termos do comprimento de localização  $\xi$ . No limite de localização fraca,  $\xi > l$ , enquanto que para localização forte,  $\xi \ll l$ , sendo  $l$  é o livre caminho médio.

Espera-se que o papel das interações seja distinto no caso de estados estendidos e no caso de estados localizados.

Enquanto no Regime de Localização Fraca, por ser possível um tratamento perturbativo, a teoria de transporte incluindo o papel das diversas interações é hoje bem entendida [12, 11], o Regime de Localização Forte ainda permanece um campo aberto a investigações.

Uma das primeiras questões que se levantou a respeito das interações em sistemas desordenados foi o fato de que Altshuler et al (1980) [53] mostraram teoricamente que o aumento logarítmico da resistividade com o decréscimo da temperatura ob-

servado experimentalmente podia ser tanto devido a efeitos de interferência quântica como devido à interação Coulombiana entre os elétrons, a única diferença estando no prefator desse termo [47]. Como distinguir então entre efeitos de localização e de interação?

O campo Magnético apresenta-se como uma ferramenta útil para distinguir entre efeitos de localização e efeitos de interação. O caso em que estamos interessados corresponde à férmions com carga sem spin. Tanto funções de onda como o espectro de energia dependem do campo magnético. (Não estamos considerando efeitos de quantização dos níveis de Landau.) A presença do campo magnético implica na introdução de uma fase nas funções de onda associada com o potencial vetor  $\vec{A}$ , dada por [69]:

$$\varphi = \frac{e}{hc} \oint_C \vec{A}(\vec{r}) d\vec{r} = 2\pi \frac{e}{hc} \Phi, \quad (1.8)$$

onde a integral é sobre a trajetória do elétron e  $\Phi$ , o fluxo através do contorno  $C$ , com  $\frac{hc}{e} = \Phi_0$  definido como quantum de fluxo. Isso significa que processo de interferência quântica é alterado na presença do campo magnético.

Uren et al. (1980) [48], observaram que enquanto a localização leva a uma magnetoresistência negativa, associada com o aumento do comprimento de localização, a interação elétron-elétron leva a uma magnetoresistência positiva.

Oscilações da magnetoresistência em função do campo magnético aplicado (Efeito Aharonov-Bohm), observadas em cilindros de Mg por Sharvin (1981) [52], são também uma evidência do fenômeno da interferência quântica.

Uma dos efeitos mais interessantes associados com o campo magnético está rela-



cionado com as transições Metal-Isolante induzidas por este [61, 62, 54].

Se por um lado os efeitos da interferência quântica são capazes de explicar quantitativamente o comportamento negativo da magnetoresistência no limite de localização fraca [42], de outro lado, no caso da localização forte, ela não é suficiente para descrever os resultados experimentais observados, sugerindo que algum outro mecanismo também contribua para o decréscimo da magnetoresistência [57, 58].

Observa-se [50], que na presença de interação spin-órbita, há um decréscimo logarítmico da resistência com o decréscimo da temperatura, podendo compensar o efeito de localização na presença de campo magnético. Esse efeito foi observado em filmes de Mg dopados com Au. A presença de Au, que tem forte interação spin-órbita, faz com que a magnetoresistência mude drasticamente a baixas temperaturas. Estes resultados experimentais são explicados teoricamente por Hikami et al (1980) [51].

Medidas de transporte em filmes de Cu/Ge, Ag/Ge e Au/Ge, onde a interação spin-órbita entre os elétrons de condução e os íons metálicos é conhecidamente forte, mostram que no regime de localização fraca, a magnetocondutância é sempre negativa (consequência da interação spin-órbita), enquanto que no regime de Localização Forte, a magnetocondutância é sempre positiva, uma indicação de que efeitos de localização sobrepoem-se à interação spin-órbita nesse regime [49]. Esses resultados experimentais estão de acordo com resultados numéricos obtidos por Sivan et al. (1988) [55] para modelo que inclui efeitos de interferência e presença do campo magnético e Meir et al (1991) [56], que inclui também interação spin-órbita.

Essa diferença de comportamento da magnetocondutância para os regimes de

cionado com as transições Metal-Isolante induzidas por este [61, 62, 54].

Se por um lado os efeitos da interferência quântica são capazes de explicar quantitativamente o comportamento negativo da magnetoresistência no limite de localização fraca [42], de outro lado, no caso da localização forte, ela não é suficiente para descrever os resultados experimentais observados, sugerindo que algum outro mecanismo também contribua para o decréscimo da magnetoresistência [57, 58].

Observa-se [50], que na presença de interação spin-órbita, há um decréscimo logarítmico da resistência com o decréscimo da temperatura, podendo compensar o efeito de localização na presença de campo magnético. Esse efeito foi observado em filmes de Mg dopados com Au. A presença de Au, que tem forte interação spin-órbita, faz com que a magnetoresistência mude drasticamente a baixas temperaturas. Estes resultados experimentais são explicados teoricamente por Hikami et al (1980) [51].

Medidas de transporte em filmes de Cu/Ge, Ag/Ge e Au/Ge, onde a interação spin-órbita entre os elétrons de condução e os íons metálicos é conhecidamente forte, mostram que no regime de localização fraca, a magnetocondutância é sempre negativa (consequência da interação spin-órbita), enquanto que no regime de Localização Forte, a magnetocondutância é sempre positiva, uma indicação de que efeitos de localização sobrepoem-se à interação spin-órbita nesse regime [49]. Esses resultados experimentais estão de acordo com resultados numéricos obtidos por Sivan et al. (1988) [55] para modelo que inclui efeitos de interferência e presença de campo magnético e Meir et al (1991) [56], que inclui também interação spin-órbita.

Essa diferença de comportamento da magnetocondutância para os regimes de

localização fraca e forte, é uma indicação de que os efeitos de interferência quântica na presença de interações tem papéis distintos no caso de estados estendidos e estados localizados.

De outro lado Spriet et al (1986) [54], através de medidas da condutividade elétrica em amostras de InP do tipo n, na presença de campo magnético, obtiveram as primeiras evidências de uma transição isolante-metal, seguida por outra transição metal-isolante para altos campos magnéticos. Essa observação experimental está em acordo com previsões teóricas anteriormente feitas por Shapiro (1984). Uma suposição para esse tipo de comportamento, é que primeiro o campo magnético leva a uma deslocalização dos estados eletrônicos, devido a uma interferência construtiva das funções de onda, e para altos campos há um encolhimento das funções de onda, localizando os estados eletrônicos [63]. Mais recentemente, Jiang et al (1992) [57] observaram num estudo experimental sobre magnetoresistência de gás de elétrons bi-dimensional no Regime de Localização Forte, que para baixos campos há um decréscimo da magnetoresistência, enquanto que para altos campos ela cresce. Esses resultados estão de acordo com estudos numéricos realizados por Bockstedte et al (1993) [60] para um sistema modelado por um hamiltoniano Tight-Binding com desordem apenas fora da diagonal na presença de campo magnético.

Podemos ver que no regime de localização forte não há um consenso sobre quais os efeitos que estão sendo observados, e tão pouco uma teoria que seja capaz de explicar esses efeitos.

No capítulo 4 vamos ver, através de cálculos da DOS, como o Campo Magnético

afeta a localização dos estados eletrônicos, em função do grau de desordem apresentado pelo sistema.

## 1.5 Modelos

O modelo mais simples para estudar o efeito da desordem na localização dos estados eletrônicos corresponde ao caso de elétrons sem spins, não interagentes, numa rede estática, onde interações elétron-elétron, elétron-fônon, e interações com campos externos não são considerados. Nesse limite, temos então um Hamiltoniano do tipo Tight Binding, com interações a primeiros vizinhos, que na representação de sítios, e apenas um orbital por sítio é expresso por:

$$\mathbf{H} = \sum_i E_i |i\rangle \langle i| + \sum_i V_i |i\rangle \langle i+1| + h.c. \quad (1.9)$$

O hamiltoniano expresso pela equação 1.9 é bastante geral, podendo ser particularizado para representar diversos tipos de desordem, como mostramos abaixo. Esse tipo de hamiltoniano é usado não somente para o estudo de propriedades eletrônicas em sistemas desordenados, mas também propriedades vibracionais [14], entre outras.

### 1.5.1 Modelo de Anderson

Neste modelo, a desordem é do tipo diagonal, onde os níveis de energia  $E_i$  estão distribuídos aleatoriamente num intervalo de largura  $W$ . A integral de “hopping” entre primeiros vizinhos,  $V_i$ , é tomada como constante e igual a  $V$ . O parâmetro  $W/V$  é definido como parâmetro de desordem, e o limite  $W/V \ll 1$  é denominado limite de desordem fraca.

### 1.5.2 O Modelo da Liga Binária e o “Quantum Site (Bond) Percolation Model”

Uma Liga Binária, pode ser representada pelo mesmo hamiltoniano da equação 1.9, com as autoenergias  $E_i$  podendo assumir dois valores  $E_A$  ou  $E_B$ , dependendo do sítio  $i$  estar sendo ocupado por um átomo da espécie A ou B respectivamente. Define-se o parâmetro  $\delta = (E_B - E_A)/W$  (onde  $W$  é a largura da banda) como parâmetro de desordem diagonal. A desordem fora da diagonal é caracterizada pelo parâmetro definido como a diferença entre as integrais de “hopping” Como as integrais de “hopping” estão diretamente ligadas com as larguras das bandas dos elementos puros, em geral o parâmetro de desordem fora da diagonal é definido como  $(W_A - W_B)/W$  O termo de “hopping” é tomado na maioria dos casos como constante e igual a  $V$ . Isto se deve ao fato de que no caso dos metais de transição, o termo de “hopping” varia muito menos que os níveis atômicos de energia [28], como indica esquema ilustrado na figura 1.4

O caso em que  $|E_A - E_B| \gg V$ , corresponde ao “Quantum Site Percolation Model”, onde duas subbandas separadas são formadas. No caso do “Quantum Bond Percolation Model”, as autoenergias  $E_i$  são tomadas como constantes, e o parâmetro de interação  $V_i$  é tomado como  $V$  se a ligação entre primeiros vizinhos for do tipo AB e zero nos demais casos, ou vice versa.

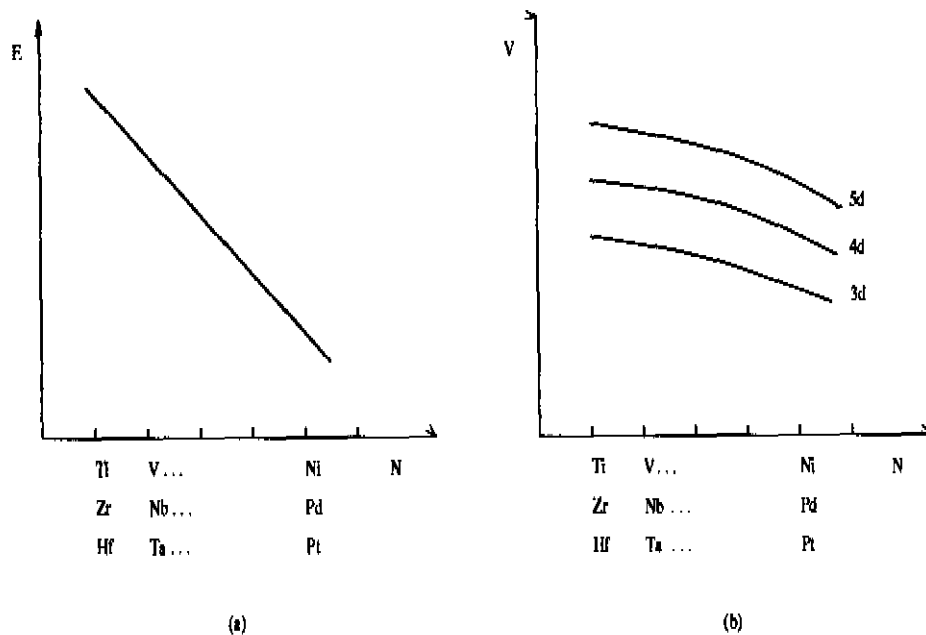


Fig. 1.4: Comportamento Qualitativo das variações típicas dos níveis de energia atômicos em escalas comparáveis: (a) e das integrais de interação (b)

## 1.6 Métodos

A ausência da simetria translacional é o principal obstáculo na construção de uma teoria quantitativa comparável em precisão e eficiência com as existentes para sólidos cristalinos, baseadas no teorema de Bloch.

Devido a presença da desordem a solução exata do problema envolveria a diagonalização de matrizes  $N \times N$ , (onde  $N$  é o número de sítios) para cada configuração possível, o que do ponto de vista computacional limita muito o tamanho dos sistemas a serem estudados.

Soluções analíticas se reduzem a casos bastantes simples, em geral em 1 dimensão. Em 2 e 3 dimensões soluções perturbativas podem ser obtidas para o caso de desordem

fraca [10].

Dentro desse contexto, o desenvolvimento de métodos numéricos que tentem minimizar tanto o tempo de computação quanto a memória envolvida nos cálculos é extremamente importante.

Métodos de "Finite-Size Scaling" [39], onde se calcula a propriedade de sistemas finitos, e através de seu comportamento em função do tamanho, fazem previsões para o sistema real, são bastante úteis no caso de sistemas desordenados, onde o tamanho representa uma limitação nos cálculos.

Do ponto de vista do desenvolvimento de uma teoria unificada para sistemas desordenados como a Teoria de Bloch para sistemas cristalinos, a Aproximação do Potencial Coerente (CPA) [10, 23], é a que mais tem sido utilizada. Basicamente consiste em fazer uma aproximação tipo campo médio, onde se trata um átomo num potencial efetivo, ou um cluster de átomos num potencial efetivo. No primeiro caso, os resultados obtidos são em geral bastante incipientes e não fornecem uma estrutura detalhada do espectro, não permitindo assim qualquer conclusão sobre a localização dos estados eletrônicos. No segundo caso, se depara com o problema do tamanho do cluster que pode ser tratado, o que limita novamente os resultados assim obtidos. Outra limitação dos métodos que envolvem aproximações tipo campo médio está no limite de percolação quântica, quando duas espécies muito distintas estão presentes.

Independentemente da aproximação utilizada para resolver numericamente o problema, os métodos podem ainda ser classificados como ab-initio ou fenomenológicos. Dentro dos métodos ab-initio, utiliza-se em geral a aproximação de CPA, e/ou Método

de Recursão [29]. Os cálculos são autoconsistentes e bases tipo LMTO (Linear Muffin Thin Orbitals) são utilizadas. [30, 33, 31]. A característica dos métodos fenomenológicos (ou semi-empíricos), é a de que alguns parâmetros como por exemplo integrais de hopping, entram como dados nos cálculos, e não são obtidos diretamente como nos métodos ab-initio.

A escolha de um método ou outro, é bastante discutida. Enquanto que os métodos ab-initio promovem resultados do ponto de vista quantitativo melhores, permitindo uma comparação mais próxima com o experimento, os métodos fenomenológicos permitem uma investigação de quais são os fenômenos físicos relevantes na observação do comportamento de uma determinada propriedade.

## 1.7 Dados Experimentais

Uma dificuldade básica ao compararmos resultados obtidos experimentalmente com os previstos teoricamente em sistemas desordenados, está relacionada ao fato das propriedades físicas medidas serem muito sensíveis à preparação das amostras.

Algumas das propriedades estudadas com o intuito de verificar efeitos de localização são: resistividade, magnetoresistência, espectros de absorção, condutividade.

Com relação a DOS, os experimentos de absorção não dão detalhes da estrutura. Em geral são utilizados para determinar gaps. Efeitos de interação elétron-buraco (excitons) e interações com fônons fazem com que o efeito puramente da desordem seja mascarado.

A maneira mais direta de se distinguir entre estados localizados e estendidos



nesse caso é através de medidas de condutividade elétrica à baixas temperaturas, já que para temperaturas muito baixas, não haveria a contribuição de fônons para a condutividade.

O comportamento da condutividade elétrica em função da temperatura é distinto para estados estendidos e para estados localizados . No caso de estados estendidos, espera-se que a dependência com a temperatura seja menor. Por outro lado, estados localizados terão uma pequena contribuição para a condutividade à baixas temperaturas, sendo que esta contribuição deve aumentar a medida que aumenta a temperatura, devido a interação com fônons, permitindo o "hopping" de um elétron de um estado localizado para outro.

Outras informações sobre a localização dos estados eletrônicos em sistemas desordenados podem ser obtidas através de propriedades magnéticas. No caso de estados localizados, devido a repulsão Coulombiana ser muito forte, espera-se que cada estado tenha apenas um elétron com spin não emparelhado, dando origem a uma susceptibilidade paramagnética.

Medidas da magnetoresistência também são utilizadas para estudar localização dos estados eletrônicos [42, 11].

## Capítulo 2

# Um Novo Método de Cálculo da DOS de Sistemas Desordenados

Neste capítulo apresentamos um novo método de cálculo para a DOS de sistemas bidimensionais e tridimensionais, que fornece uma estrutura detalhada, permitindo assim inferirmos sobre a localização dos estados eletrônicos.

### 2.1 Sistemas Bidimensionais

O sistema bidimensional é aproximado dentro da idéia de “Finite -Size Scaling” [40, 15] por uma faixa de largura  $M$  e comprimento  $N$  como ilustra a figura 2.1.

O hamiltoniano usado para representar o sistema é do tipo Tight-Binding, com interação apenas entre primeiros vizinhos, e um orbital por sítio, definido por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \sum_{n,m} E_{nm} |n, m\rangle \langle n, m| + \sum_n t_x |n, m\rangle \langle n+1, m| + h.c. \\ & + \sum_m t_y |n, m\rangle \langle n, m+1| + h.c. , \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde  $0 \leq n \leq N$ , com  $N \rightarrow \infty$ , e  $0 \leq m \leq M$ , com  $M$  sendo a largura da faixa. Assumimos condições de contorno periódicas na dimensão finita, e desordem diagonal, onde a energia por sítio pode assumir dois valores  $E_A$  ou  $E_B$ , o que representa o caso

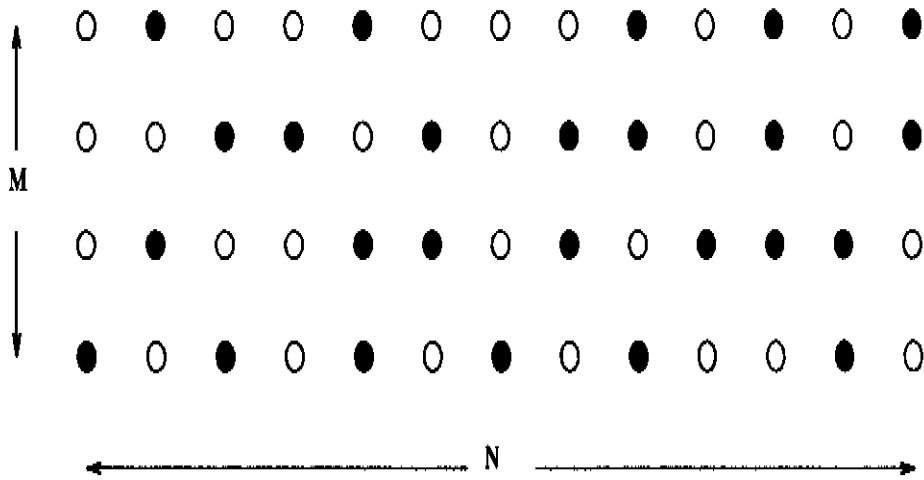


Fig. 2.1: Geometria de uma faixa com dimensões  $N$  e  $M$ .

de uma liga binária, com  $t_x = t_y = V$ . Estudamos aqui o limite de Percolação Quântica que corresponde a:

$$|E_A - E_B| \gg |V|, \quad (2.2)$$

onde temos a formação de duas subbandas separadas, uma centrada em  $E_A$  e a outra em  $E_B$ .

A DOS para o caso puro (onde todos os sítios são ocupados por átomos do mesmo tipo) é obtida através da convolução das DOS de duas cadeias lineares:

$$\mathcal{D}_{ddim}(E) = \int \mathcal{D}_{(d-1)dim}(E') \mathcal{D}_{1dim}(E - E') dE'. \quad (2.3)$$

Este resultado é exato como demonstramos abaixo para o caso de uma rede quadrada pura.

Seja  $|m, n\rangle$  a base na representação de sítios para Hamiltoniano dado pela

equação (2.1). Fazendo a transformada de Fourier na direção  $x$ , temos:

$$|m, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikn} |m, k\rangle. \quad (2.4)$$

Com essa nova base a parte diagonal do hamiltoniano é expressa por:

$$\sum_{m,n} E_0 |m, n\rangle \langle m, n| = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \sum_{k,k'} E_0 e^{ikn} e^{-ik'n} |m, k\rangle \langle m, k'|, \quad (2.5)$$

onde

$$\frac{1}{N} \sum_n e^{i(k-k')n} = \delta_{k,k'}, \quad (2.6)$$

logo:

$$\sum_{m,n} E_0 |m, n\rangle \langle m, n| = \sum_m \sum_k E_0 |m, k\rangle \langle m, k|. \quad (2.7)$$

O termo fora da diagonal na direção  $x$  fica:

$$\begin{aligned} \sum_{m,n} t_x (|m, n\rangle \langle m, n+1| + h.c.) &= \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,k'} \sum_{m,n} t_x (e^{ikn} e^{-ik'(n+1)} |m, k\rangle \langle m, k'| + h.c.) \\ &= \sum_m \sum_{k,k'} \frac{1}{N} \sum_n e^{i(k-k')n} (e^{-ik'} t_x |m, k\rangle \langle m, k'| + h.c.) \\ &= \sum_{m,k} 2t_x \cos(k) |m, k\rangle \langle m, k|, \end{aligned} \quad (2.8)$$

e o termo fora da diagonal na direção  $y$ :

$$\begin{aligned} \sum_{m,n} t_y |m, n\rangle \langle m+1, n| + h.c. &= \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,k'} \sum_{m,n} t_y e^{ikn} e^{-ik'n} |m, k\rangle \langle m+1, k'| + h.c. \\ &= \sum_{m,k} t_y (|m, k\rangle \langle m+1, k| + |m+1, k\rangle \langle m, k|) \end{aligned} \quad (2.9)$$

O hamiltoniano efetivo na nova representação  $|m, k\rangle$  fica:

$$\mathbf{H} = \sum_{m,k} (E_0 + 2t_x \cos(k)) |m, k\rangle \langle m, k| + \sum_{m,k} t_y (|m, k\rangle \langle m+1, k| + |m+1, k\rangle \langle m, k|). \quad (2.10)$$

Na representação  $|m, k\rangle$ ,  $\mathbf{G}(z)$  [43] pode ser expressa como:

$$\mathbf{G}(z) = \sum_{m,k} \frac{|m, k\rangle \langle m, k|}{z - E(k, m)}, \quad (2.11)$$

onde  $E(k, m)$  são os autovalores do hamiltoniano efetivo, expressos como:

$$E(k, m) = E_0 + 2t_x \cos(k) + \lambda_m = E_x(k) + \lambda_m, \quad (2.12)$$

com:

$$E_x(k) = E_0 + 2t_x \cos(k) \quad (2.13)$$

onde  $\lambda_m$  corresponde ao autovalor da cadeia transversal. Reescrevendo a função de Green :

$$\mathbf{G}(z) = \sum_{m,k} \frac{|m, k\rangle \langle m, k|}{z - E_x(k) - \lambda_m}. \quad (2.14)$$

O elemento da função de Green  $G_{m'n', mn}$  pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} \langle m', n' | G(z) | m, n \rangle &= \sum_{m''} \delta_{m'' m'} \delta_{m'' m} \sum_k \frac{\langle m'', n' | m'', k \rangle \langle m'', k | m, n \rangle}{z - \lambda_{m''} - E_x(k)} \\ &= \delta_{m, m'} \sum_k \frac{e^{ik(n'-n)}}{z - \lambda_m - E_x(k)} \\ &= \delta_{m, m'} \frac{V}{(2\pi)^d} \int_{BZ} dk \frac{e^{ik(n'-n)}}{z - \lambda_m - E_x(k)} \end{aligned} \quad (2.15)$$

O elemento diagonal de  $G$ :

$$\langle m, n | G(z) | m, n \rangle = \frac{L}{2\pi N} \int_{BZ} dk \frac{1}{z - \lambda_m - E_x(k)} \quad (2.16)$$

A DOS está relacionada com a função de Green por [43]:

$$\mathcal{D}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{m,n} G(E), \quad (2.17)$$

com:

$$\frac{1}{NM} \sum_{m,n} \langle m, n | G(z) | m, n \rangle = \frac{1}{M} \sum_m \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{1}{z - \lambda_m - E_0 - 2t_x \cos(k)} \quad (2.18)$$

Assim temos:

$$\mathcal{D}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{m,n} G(E) = \sum_m \mathcal{D}_{1dim}(E - \lambda_m). \quad (2.19)$$

onde  $\mathcal{D}_{1dim}(E - \lambda_m)$  é a DOS de uma cadeia linear centrada no autovalor  $\lambda_m$ . Os autovalores  $\lambda_m$  são os autovalores correspondentes a cadeia transversal.

Para o caso desordenado, propomos baseados no caso puro, que a DOS da faixa, seja obtida através das DOS das cadeias lineares, segundo equação:

$$\mathcal{D}^M(E) = \sum_c P_c \sum_{i=1}^M n_c(E_i) \mathcal{D}_{1dim}(E - E_i), \quad (2.20)$$

onde  $\mathcal{D}^M$  corresponde a DOS de uma faixa de largura  $M$ ,  $E_i$  são os autovalores para uma cadeia finita transversal de  $M$  átomos para uma dada configuração.  $n_c(E_i)$  corresponde a distribuição dos autovalores  $E_i$  para cada configuração, ou seja o peso de cada autovalor.  $P_c$  corresponde a probabilidade de cada configuração, sendo que no limite de  $M$  indo para infinito temos:

$$\lim_c \sum P_c n_c(E_i) = \mathcal{D}_{1dim}(E_i). \quad (2.21)$$

Assim para o limite  $M \rightarrow \infty$ , a DOS do sistema bidimensional fica dada pela convolução das DOS de duas cadeias lineares:

$$\mathcal{D}_{2dim}(E) = \int \mathcal{D}_{1dim}(E_i) \mathcal{D}_{1dim}(E - E_i) dE_i. \quad (2.22)$$

Esse resultado pode ser generalizado para dimensão  $d$ :

$$\mathcal{D}_{ddim}(E) = \int \mathcal{D}_{(d-1)dim}(E_i) \mathcal{D}_{1dim}(E - E_i) dE_i. \quad (2.23)$$

A DOS em  $d$ -dimensões é dada pela convolução da distribuição de autovalores na dimensão  $d - 1$  com a DOS de cadeias lineares.

### 2.1.1 Caso Puro

Esse método de cálculo da DOS foi implementado numericamente para o caso conhecido de uma rede quadrada pura, onde as energias por sítio  $E_0$  são iguais, tendo sido tomadas iguais a zero. O parâmetro de interação entre primeiros vizinhos  $V$  foi tomado igual a 1.

Na figura 2.2 mostramos os resultados obtidos para a cadeia transversal com número de átomos  $M=100$ ,  $M=500$  e o resultado exato obtido pela convolução de duas cadeias lineares. A DOS das cadeias lineares foram obtidas numericamente implementando o método “Negative Factor Counting” (NFC) [14] para  $N = 10^4$  átomos (ver Apêndice). Todos os cálculos numéricos foram realizados nas Workstations da Sun modelo correspondente a Sparc10. O tempo de CPU para 1 cadeia é de aproximadamente 2.500s para passo de energia de  $5 \cdot 10^{-4}$ , para passo igual a  $5 \cdot 10^{-3}$  o tempo cai para CPU=240s e para passo =  $5 \cdot 10^{-2}$  CPU=25s. Para a convolução o tempo médio é de CPU=100s.

Pelos resultados da figura 2.2, podemos verificar que o método proposto para o cálculo da DOS é eficiente e reproduz de maneira exata o caso da rede quadrada pura. Podemos ver que ainda para  $N$  finito a estrutura geral da DOS já é obtida

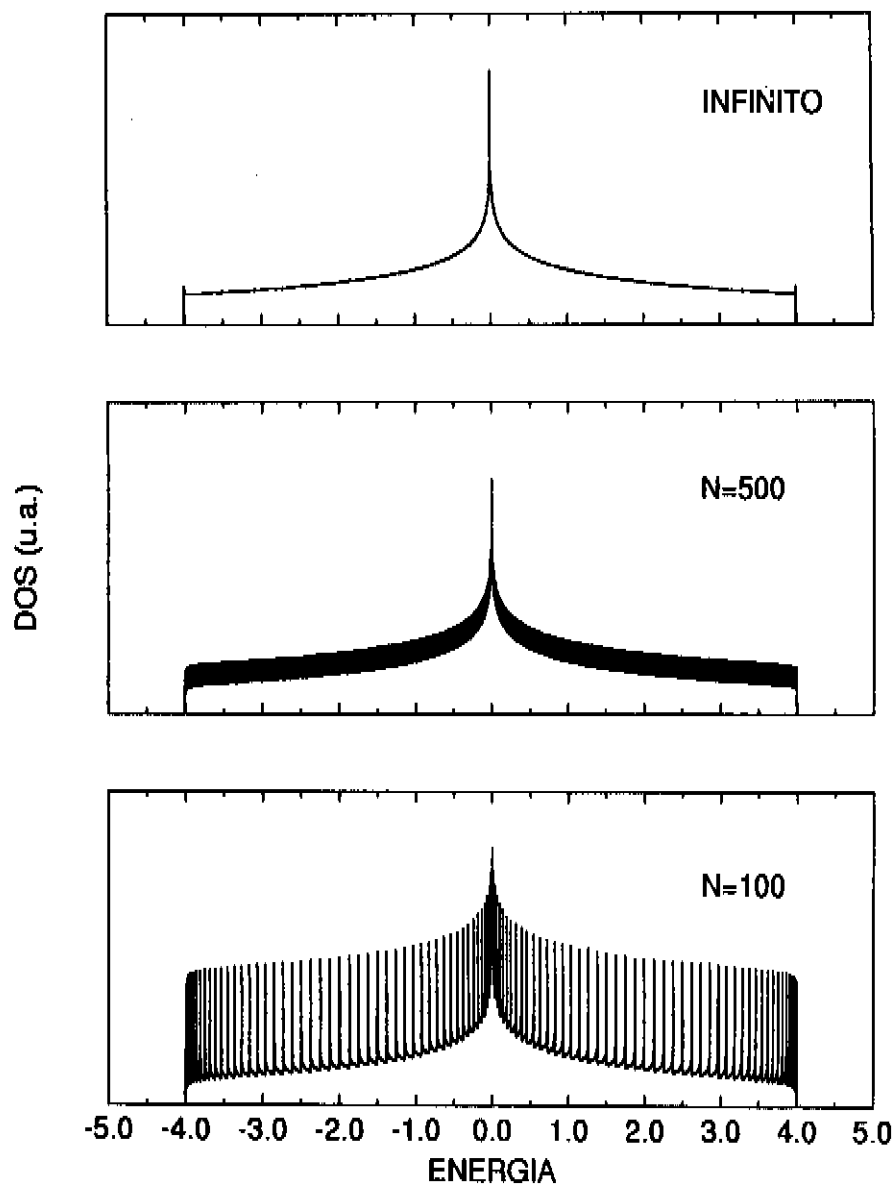


Fig. 2.2: DOS para rede quadrada - caso puro, passo igual a  $5 \cdot 10^{-4}$



assim como a largura da banda é corretamente dada por  $2zV$ , onde  $z$  é o número de coordenação, que para rede quadrada é igual a 4. As oscilações que observamos para valores de  $N$  finitos são uma característica de sistemas puros, e estão relacionadas com a coerência dos estados eletrônicos.

Na figura 2.3 ilustramos os mesmos resultados anteriores só que com a parte imaginária igual a  $5.10^{-3}$ . Podemos ver que a amplitude das oscilações decresce quando aumentamos a parte imaginária. Comportamento este esperado em função da presença das singularidades.

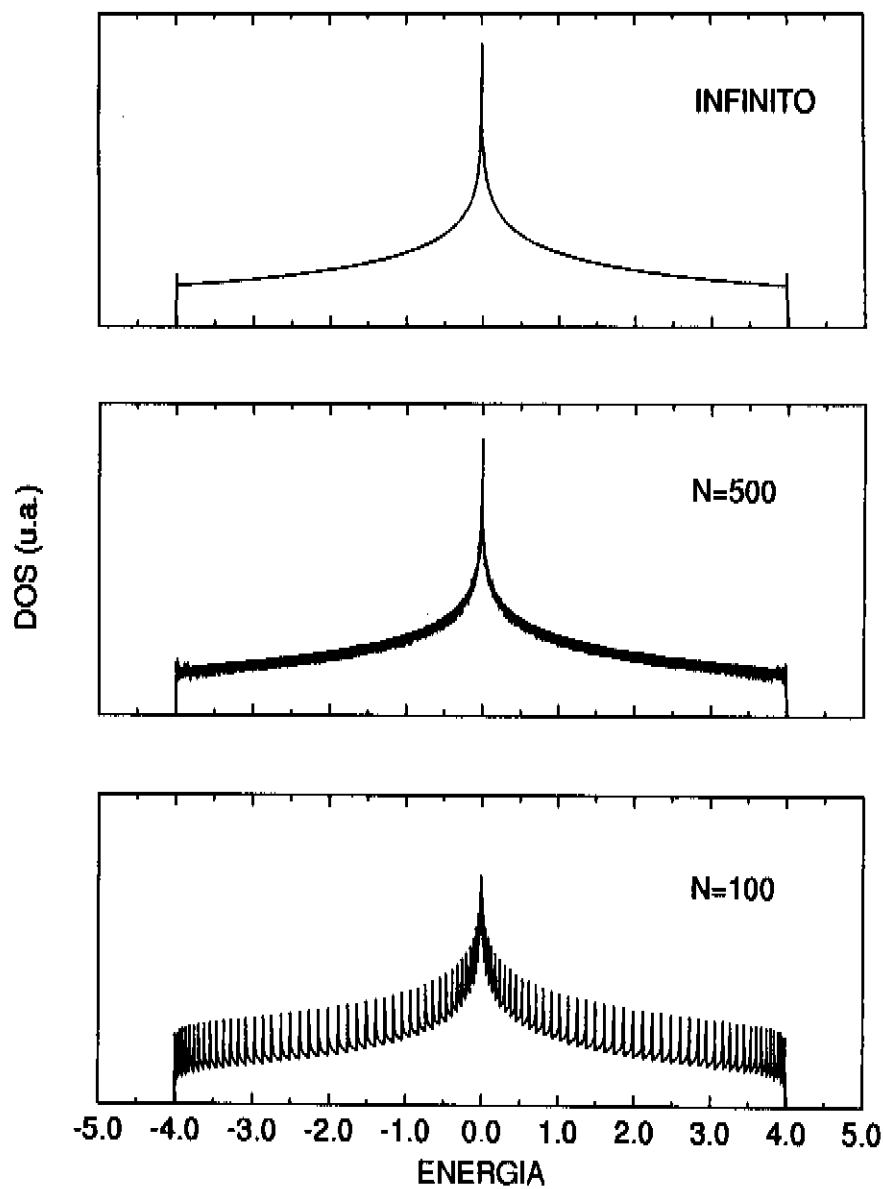


Fig. 2.3: DOS para rede quadrada - caso puro, passo igual a  $5 \cdot 10^{-3}$

## 2.1.2 Desordem Aleatória

O caso da desordem aleatória, onde a probabilidade de ocupação de cada sítio ser ocupado por um átomo tipo A ou B é dada pela concentração desses átomos, e por sua vez todas as configurações tem a mesma probabilidade de ocorrer foi calculado para concentrações iguais  $c_A = c_B = 0.5$ . Tomamos o limite de percolação quântica [65], onde  $E_B \gg E_A$ . Adotamos  $E_A = 0$  e  $E_B = 1000$ , e  $V = 1$ . Nesse limite temos a formação de duas subbandas, uma centrada em  $E_A$  e outra centrada em  $E_B$ .

Na figura 2.4 ilustramos a DOS correspondente a subbanda A para 1 cadeia apenas. Na figura 2.5 mostramos os resultados para  $M = 10$ ,  $M = 20$ , e a convolução para duas cadeias lineares e na figura 2.6 o resultado obtido por uma simulação de Monte Carlo para uma amostra de 30 por 50 sítios [66]. Na figura 2.8 comparamos a DOS de 1 cadeia com 20 cadeias e com a convolução de duas cadeias lineares, para um intervalo de energia reduzido. Podemos observar ainda que a diferença da DOS para 1 cadeia e para  $M$  finito, está no aparecimento de mais estados localizados (ver figura 2.7) , além do aumento da “largura de banda” esperado para o caso bi-dimensional (figura 2.4 e 2.5).

O tempo de CPU para  $M = 10$  cadeias é de aproximadamente 10s e para  $M = 20$  cadeias CPU=30.000s. Esse aumento no tempo deve-se ao fato de que o número de configurações aumenta com  $N$  segundo  $2^N$ . Para  $N = 10$ , temos um total de 1024 configurações e para  $N = 20$  o total de configurações é 1.048.576.

A estrutura da DOS obtida, nos leva a indicação da presença de estados localizados no sistema. Este resultado está em acordo com resultados sobre o tipo de estados

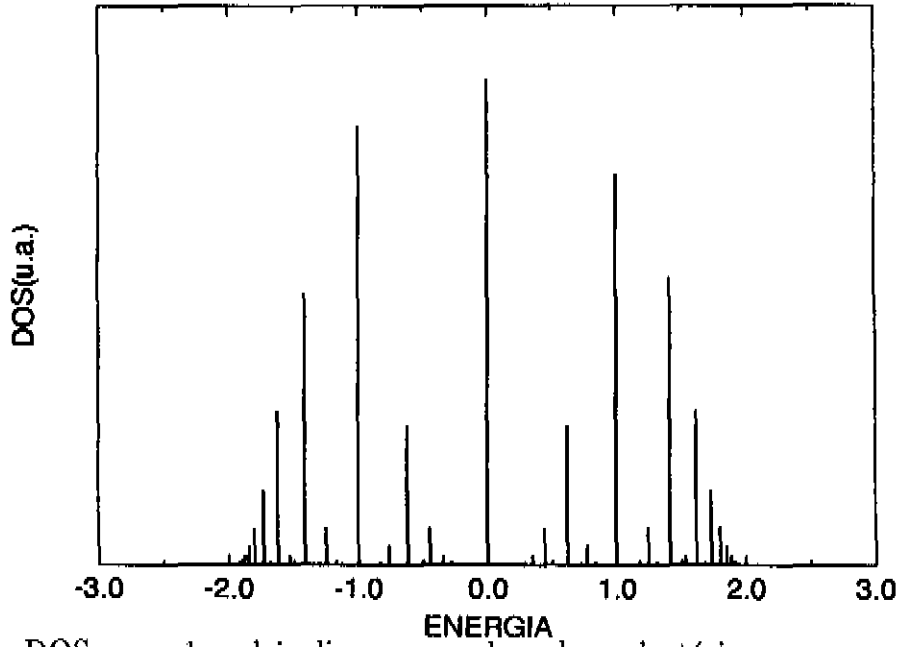


Fig. 2.4: DOS para 1 cadeia linear com desordem aleatória, com concentrações  $c_A = c_B = 0.5$ , e passo igual a  $5 \cdot 10^{-4}$

eletrônicos em sistemas bidimensionais, obtidos através de cálculos de comprimento de localização para desordem puramente aleatória [15, 20].

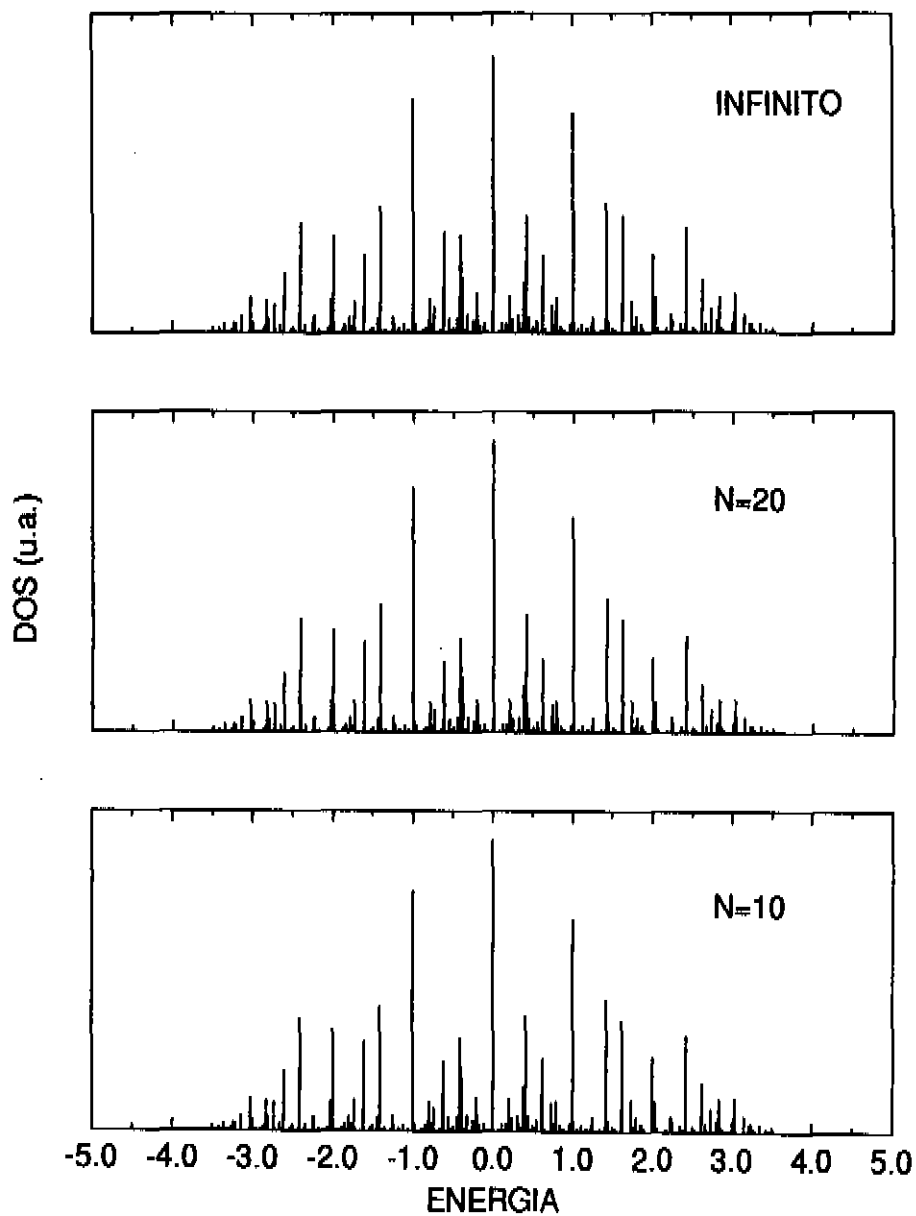


Fig. 2.5: DOS para 2dim com desordem aleatória, com concentrações  $c_A = c_B = 0.5$ , e passo igual a  $5 \cdot 10^{-4}$

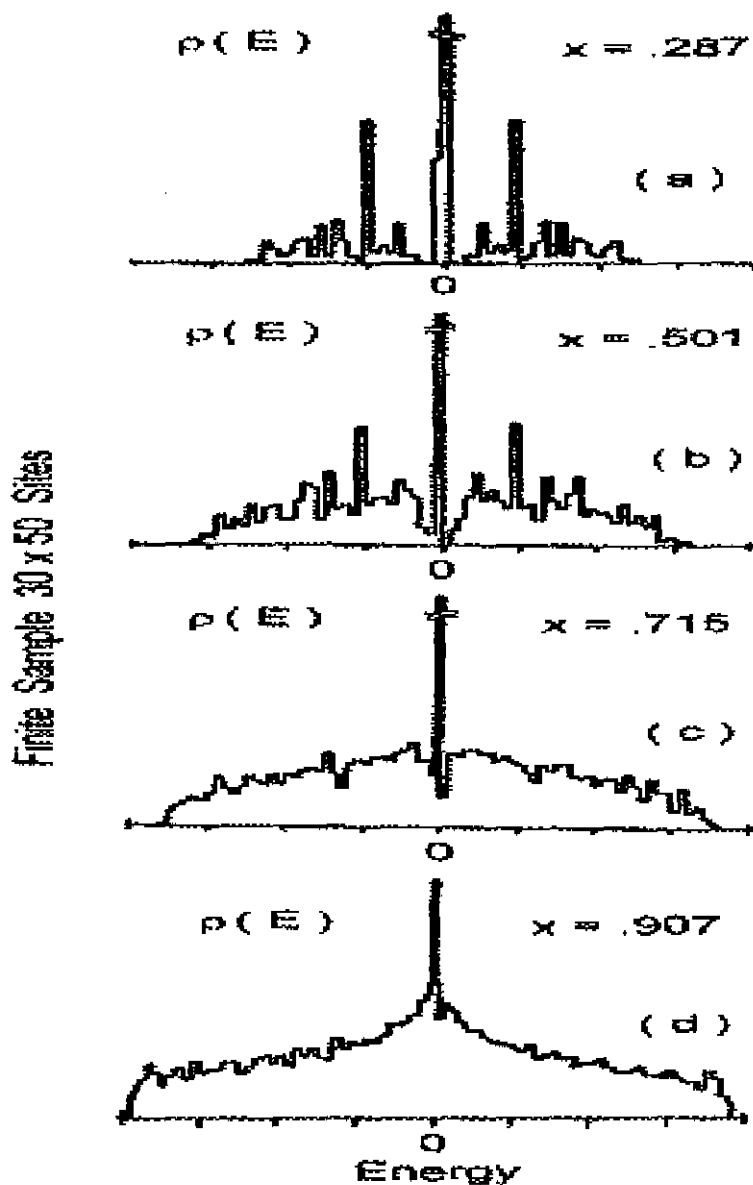


Fig. 2.6: DOS 2dim com desordem aleatória, resultados de Kirkpatrick (1972) [66], para várias concentrações  $x$

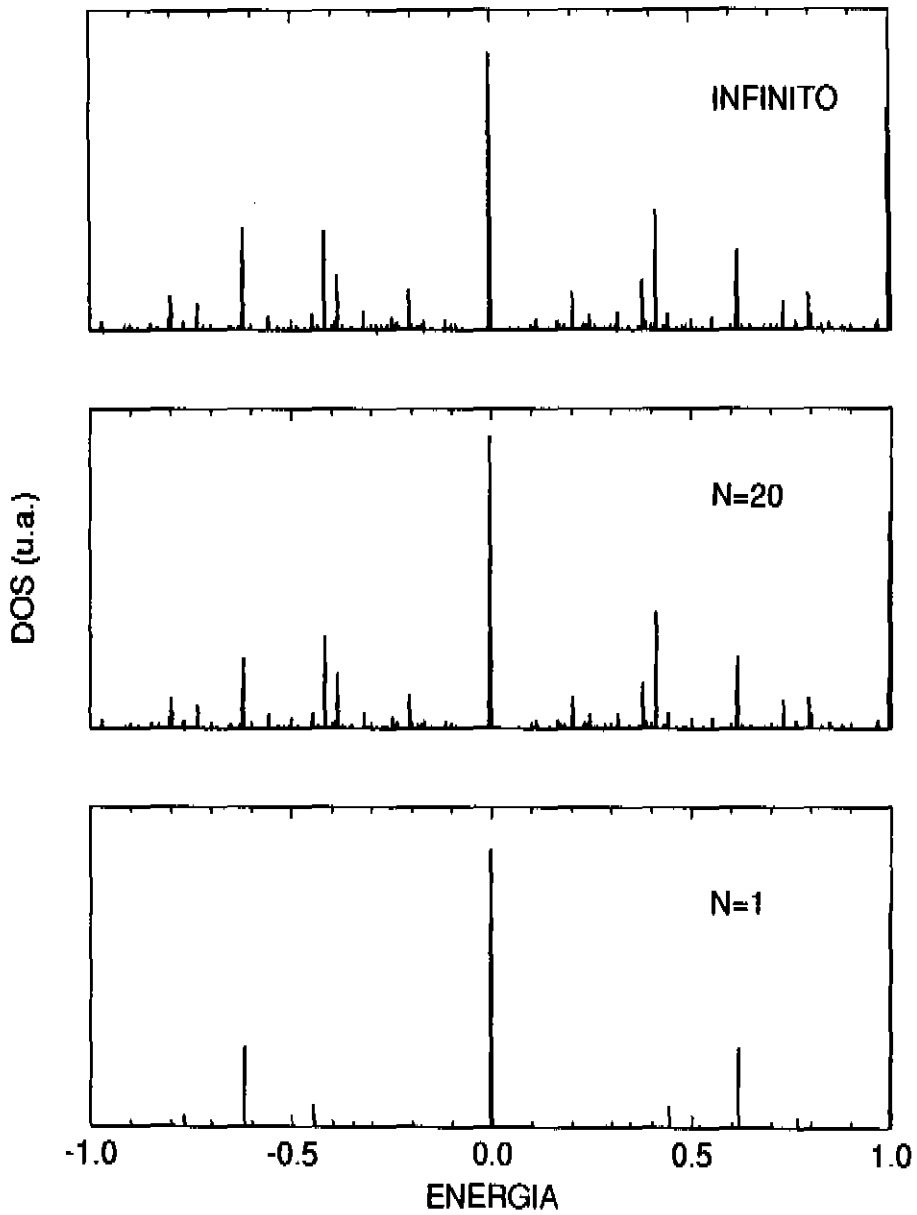


Fig. 2.7: Efeitos de tamanho - DOS para 2dim com desordem aleatória comparada com 1 cadeia, com concentrações  $c_A = c_B = 0.5$ , e passo igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

Os resultados obtidos são excelentes, visto que, o método proposto é capaz de reproduzir de maneira exata casos conhecidos como o da rede quadrada, e fornecer uma estrutura detalhada e realística da DOS para o caso desordenado. Cabe salientar que os métodos existentes na literatura para o cálculo da DOS dão em geral uma estrutura muito pobre, o que inviabiliza a caracterização dos estados eletrônicos quanto a localização. Esses métodos envolvem em geral aproximações de campo médio, como CPA (Coherent Potential Approximation) e aproximação do Cristal Virtual. A situação é ainda mais crítica quando se está estudando o limite de percolação quântica onde temos duas espécies com energias de sítio muito distintas. Um outro problema que também se depara quando se trabalha com clusters, é que o tamanho destes fica muito limitado para sistemas que não unidimensionais. Uma estrutura pobre da DOS inviabiliza qualquer análise quanto a característica dos estados eletrônicos presentes no sistema, pois espera-se no geral que estados estendidos forneçam uma curva suave da DOS, enquanto que a presença de estados localizados é associado com uma estrutura de picos [32].

Ressaltamos que o número muito maior de cadeias acopladas utilizado para o caso puro ( $N = 500$ ), que o utilizado para caso desordenado ( $N = 20$ ), para nos aproximarmos do limite infinito, está relacionado com o fenômeno da coerência quântica. Enquanto em sistemas puros o efeito de coerência quântica leva ao aparecimento das oscilações que observamos, o mesmo não acontece com o caso desordenado.



## 2.2 Sistemas Tridimensionais

O sistema estudado aqui tem a geometria de uma barra, como ilustra a Figura 2.8. Condições de contorno periódicas são assumidas nas dimensões finitas  $x$  e  $y$ .

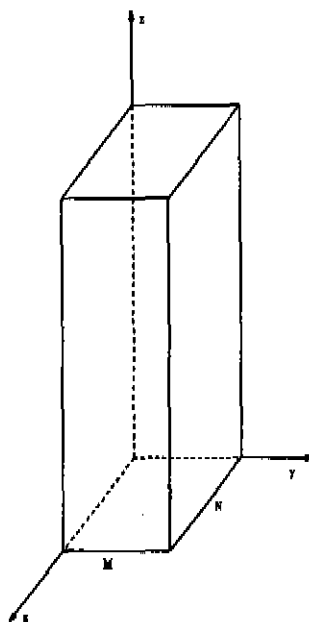


Fig. 2.8: Geometria de uma barra com seção transversal de área finita de dimensão  $N \times M$ .

A DOS para o sistema com a geometria ilustrada na figura 2.8 é dada por:

$$\mathcal{D}_{barra}(E) = \sum_C P_C \sum_{i=1}^{M \times N} d_s^{(C)}(E_i) \mathcal{D}_{1dim}(E - E_i), \quad (2.24)$$

onde  $d_s(E_i)$  representa a distribuição dos autovalores  $E_i$  de uma seção transversal de área  $M \times N$ , com  $M$  e  $N$  finitos.  $\mathcal{D}_{1dim}(E - E_i)$  corresponde a DOS de cadeias lineares centradas nos autovalores  $E_i$  e  $P_C$  a probabilidade de cada configuração para a geometria da seção.

### 2.2.1 Rede Cúbica - Caso Puro

No caso puro de uma rede cúbica, onde os  $E_i$  são todos iguais, temos apenas uma configuração e a DOS é dada pela convolução da distribuição dos autovalores da seção transversal da barra com a DOS da cadeia linear. No limite  $N \times M$  indo para infinito a distribuição dos autovalores da seção transversal é a própria DOS da rede quadrada.

$$\mathcal{D}_{barra}(E) = \sum_{i=1}^{M \times N} d_s^{(C)}(E_i) \mathcal{D}_{1dim}(E - E_i) \quad (2.25)$$

Na figura 2.9 mostramos os resultados obtidos para  $M \times N = 24, 48$  e a convolução da DOS bidimensional com a DOS unidimensional. A DOS bidimensional é a obtida no capítulo 2. Na figura 2.10 ilustramos o mesmo caso anterior só que com passo igual à  $5 \cdot 10^{-4}$ . Novamente observamos, os mesmos efeitos relacionados com a estrutura de picos, que os discutidos no caso puro bidimensional.

As assimetrias observadas na figura 2.9 estão relacionadas com o passo de energia utilizado. Podemos ver na figura seguinte que tais assimetrias praticamente desaparecem quando o passo é reduzido.

Nossos resultados evidenciam que a utilização de geometrias cilíndricas (onde uma das dimensões permanece infinita) faz com que mesmo para um tamanho pequeno da parte finita, os resultados estejam muito próximos do limite infinito. Isso representa uma vantagem frente aos métodos que envolvem clusters, onde todas as dimensões permanecem finitas, e a tendência do sistema se aproximar do limite termodinâmico é muito mais lenta [41]. Em geral o que se observa é que, os efeitos de tamanho decaem muito mais rapidamente para geometrias cilíndricas do que para geometrias

finitas.

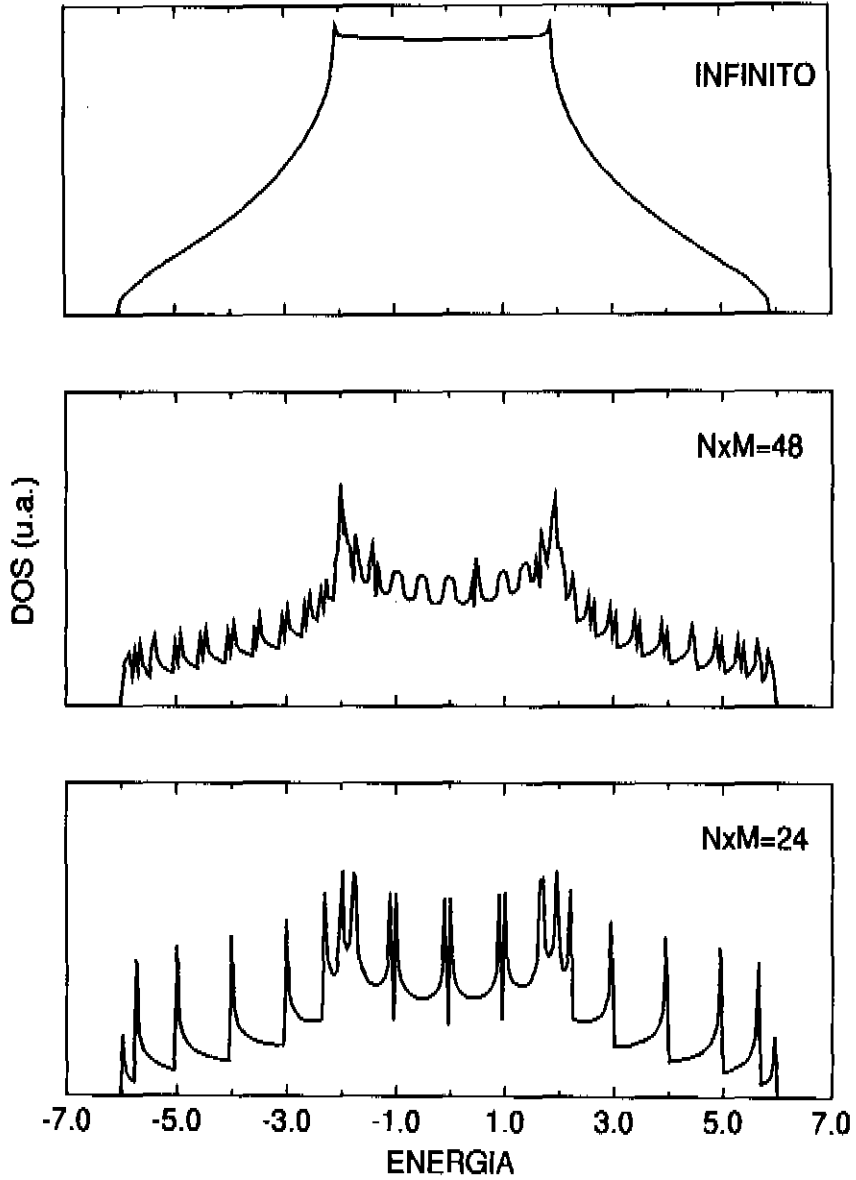


Fig. 2.9: DOS para rede cúbica - caso puro, passo igual a  $5.10^{-2}$ .

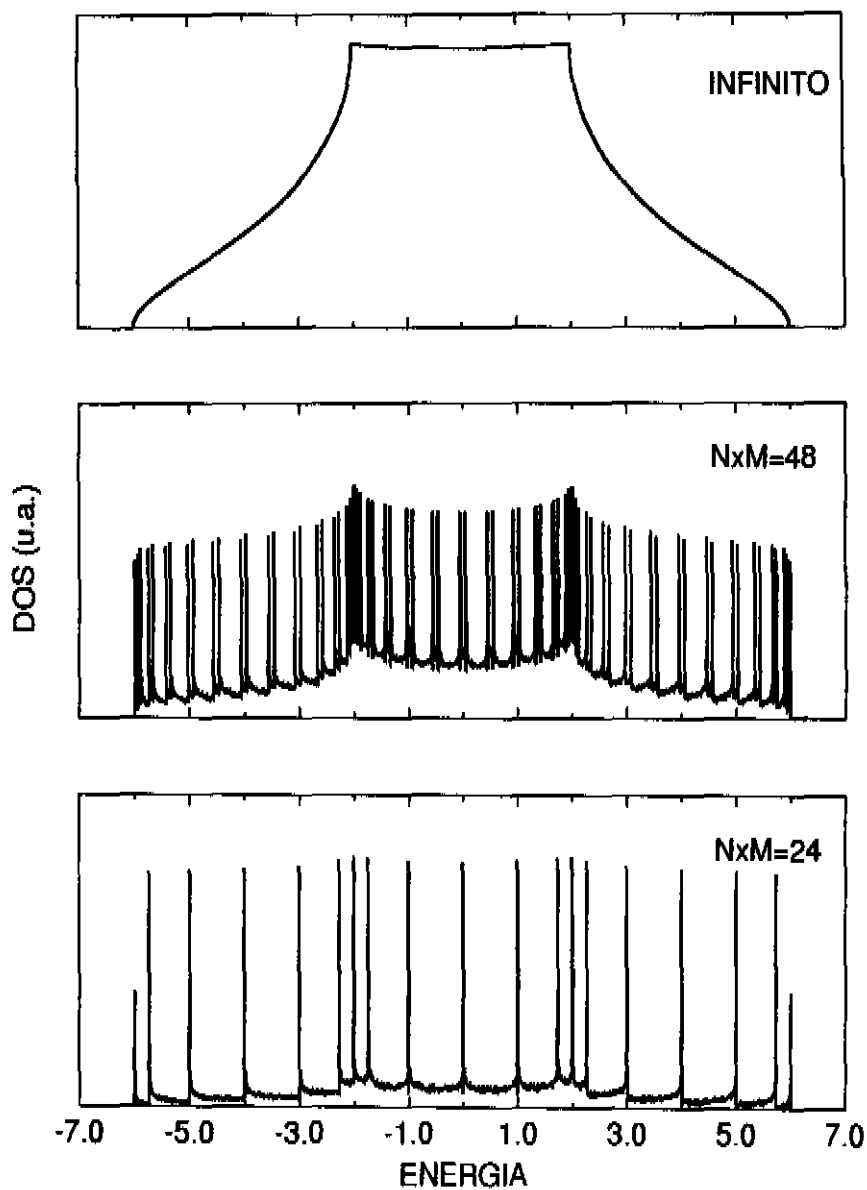


Fig. 2.10: DOS para rede cúbica - caso puro, passo igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

## Capítulo 3

# Efeitos da Ordem de Curto Alcance na Localização dos Estados Eletrônicos de Sistemas Bidimensionais

Para levar em conta a correlação entre sítios vizinhos consideramos a probabilidade de cada configuração  $P_c$  dentro da aproximação de uma cadeia Markoviana, dada através das probabilidades de pares  $p(i, i + 1)$  por:

$$P_c = c_i \frac{p(i, i + 1)p(i + 1, i + 2)p(i + 2, i + 3) \dots p(M - 1, M)}{c_i c_{i+1} c_{i+2} \dots c_{M-1}} \quad (3.1)$$

As concentrações  $c_i$  correspondem as concentrações das espécies  $c_A$  ou  $c_B$  dependendo do sítio  $i$  ser ocupado pela espécie  $A$  ou  $B$  respectivamente. No caso de desordem puramente aleatória a probabilidade das configurações são idênticas, e iguais ao produto das concentrações, ou seja:  $P_c = c_A^M c_B^M$

De maneira geral as probabilidades de pares podem ser relacionadas com o conhecido parâmetro de ordem de curto alcance, parâmetro de Cowley, pela relação [23]:

$$\sigma_C = 1 - \frac{p_{AB} + p_{BA}}{2c_A c_B}, \quad (3.2)$$

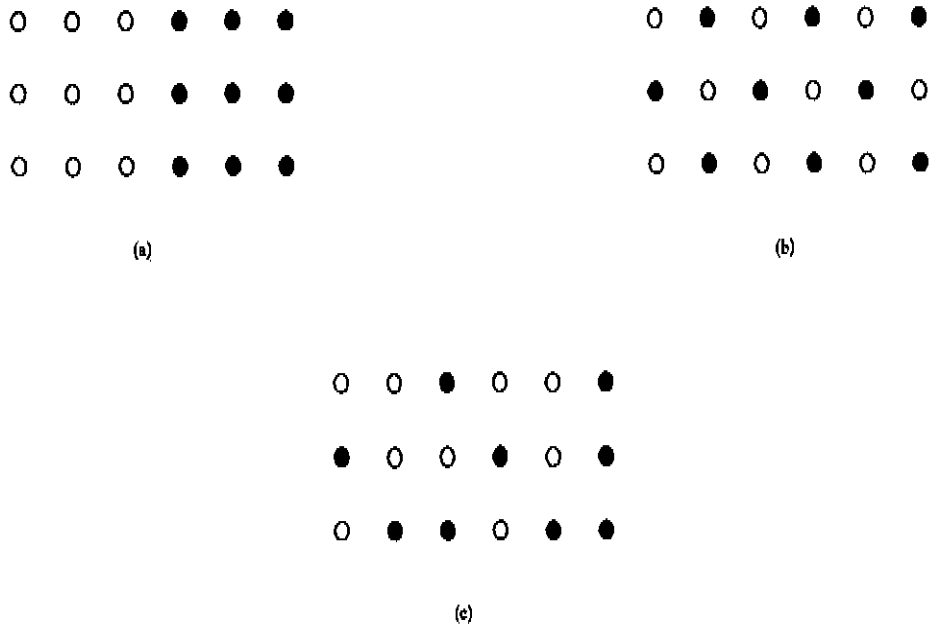


Fig. 3.1: Desordem em função do parâmetro de SRO  $\sigma_C$  para caso de concentrações iguais de ambas as espécies numa liga binária. (a)  $\sigma_C = 1$ : limite segregado, (b)  $\sigma_C = -1$ : limite ordenado, (c)  $\sigma_C = 0$ : desordem aleatória.

onde  $c_A$  e  $c_B$  são as concentrações das espécies A e B respectivamente.  $p_{AB}$  e  $p_{BA}$  são as probabilidades de ocorrer pares AB e BA respectivamente. O Parâmetro de Cowley fica restrito ao intervalo de valores:  $-1 \leq \sigma_C \leq 1$ , onde temos os seguintes limites para concentrações iguais das duas espécies ( $c_A = c_B = 0.5$ ): *i.*)  $\sigma_C = -1$  - limite segregado, temos de um lado átomos do tipo A e do outro átomos do tipo B; *ii.*)  $\sigma_C = 0$  - desordem completamente aleatória, os átomos encontram-se distribuídos de maneira randômica; *iii.*)  $\sigma_C = 1$  - caso ordenado, onde temos átomos A e B distribuídos ordenadamente.

Os resultados mostrados são para o limite de percolação quântica, onde ilustramos apenas a subbanda A.

Nas figuras 3.2 e 3.3 mostramos os resultados obtidos para o sistema perto da ordem ( $\sigma_C = -0.8$ ) e perto da segregação ( $\sigma_C = 0.8$ ) respectivamente.

Quando  $\sigma_C$  é negativo e se aproxima de  $-1$ , temos a tendência a formação de duas subredes, uma intercalada pela outra. Como estamos tratando do caso percolativo, onde as duas espécies tem energias de sítio muito distintas ( $E_B \gg E_A$ ), a estrutura da DOS mostra uma coleção de estados altamente localizados. Podemos ver que as posições dos picos estão levemente deslocadas das posições que se obtém para um cluster de 5 átomos como ilustramos na figura 3.4, que correspondem aos autovalores  $\lambda'$ s para a matriz:

$$H = \begin{pmatrix} E_A - \lambda & V & V & V & V \\ V & E_B - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ V & 0 & E_B - \lambda & 0 & 0 \\ V & 0 & 0 & E_B - \lambda & 0 \\ V & 0 & 0 & 0 & E_B - \lambda \end{pmatrix}$$

Este caso é semelhante a situação onde se tem desordem aleatória com uma das espécies com concentração muito menor que a outra. Ilustramos esse caso na figura 3.5, onde  $\sigma_C = 0$ ,  $c_A = 0.2$  e  $c_B = 0.8$ .



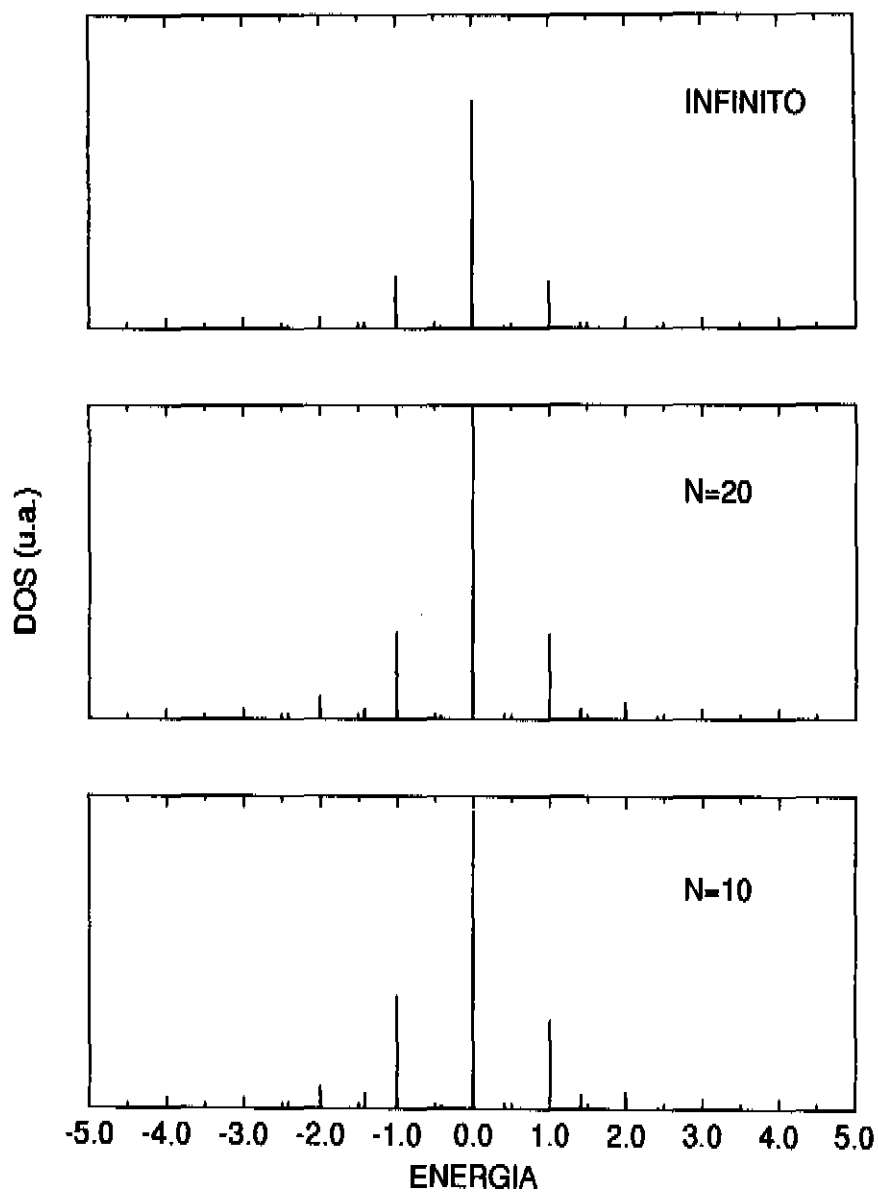


Fig. 3.2: Tendência à ordem,  $\sigma_C = -0.8$ , passo= $5 \cdot 10^{-4}$ .

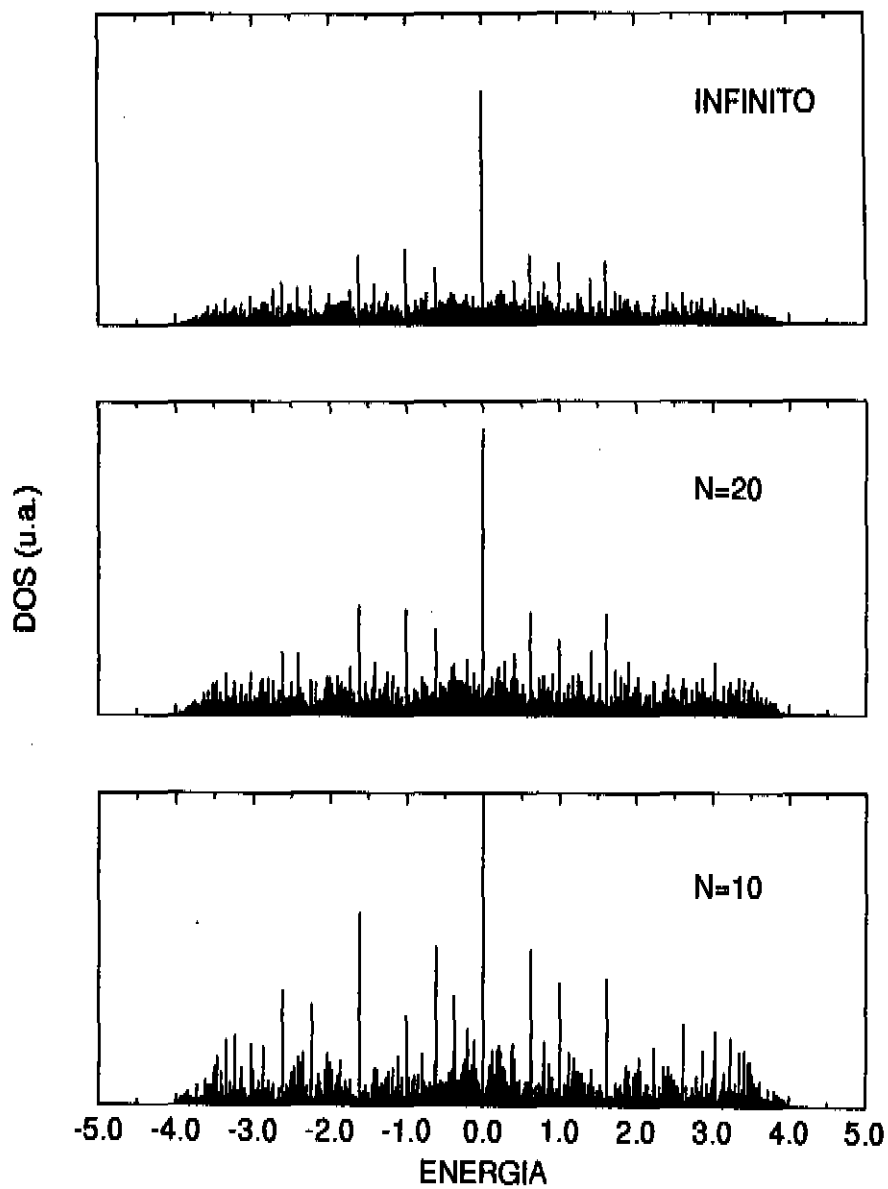


Fig. 3.3: Tendência à segregação,  $\sigma_C = 0.8$ , passo= $5 \cdot 10^{-4}$ .

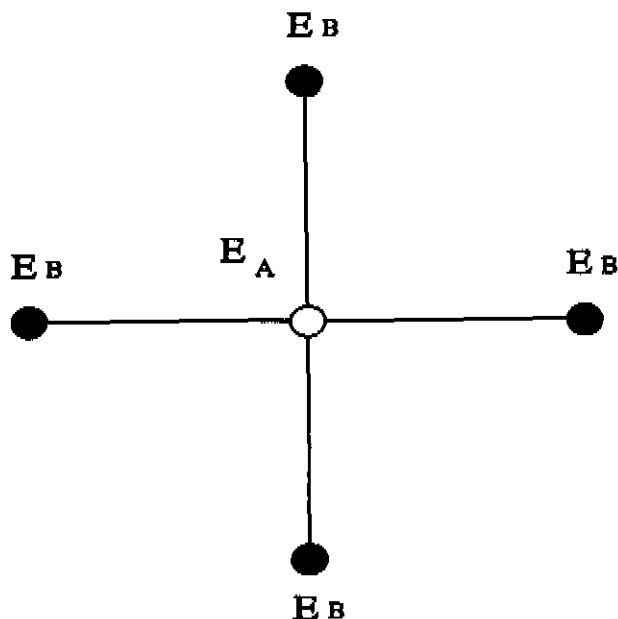


Fig. 3.4: Cluster com 5 átomos

O caso  $\sigma_C = 0$ , correspondente a desordem aleatória mostra uma estrutura bastante rica, sendo característica da presença de estados localizados no sistema. Nesse limite nossos resultados estão em acordo com os resultados da literatura que calculam o comprimento de localização  $\xi$  para modelos de Anderson e "Quantum Site Percolation" [18, 17, 43], que encontram que todos os estados são localizados em duas dimensões.

Para o limite de  $\sigma_C$  próximo de 1, as espécies tendem a segregar-se e a estrutura de bandas é composta por duas subbandas quase puras, centradas nas energias das duas espécies atômicas, respectivamente. Esse resultado é bastante interessante pois indica a possibilidade de termos não apenas estados localizados em 2 dimensões. Na figura 3.6 mostramos os resultados da DOS variando o parâmetro de ordem de curto alcance  $\sigma_C$  (SRO). As figuras seguintes correspondem ao mesmo caso ante-

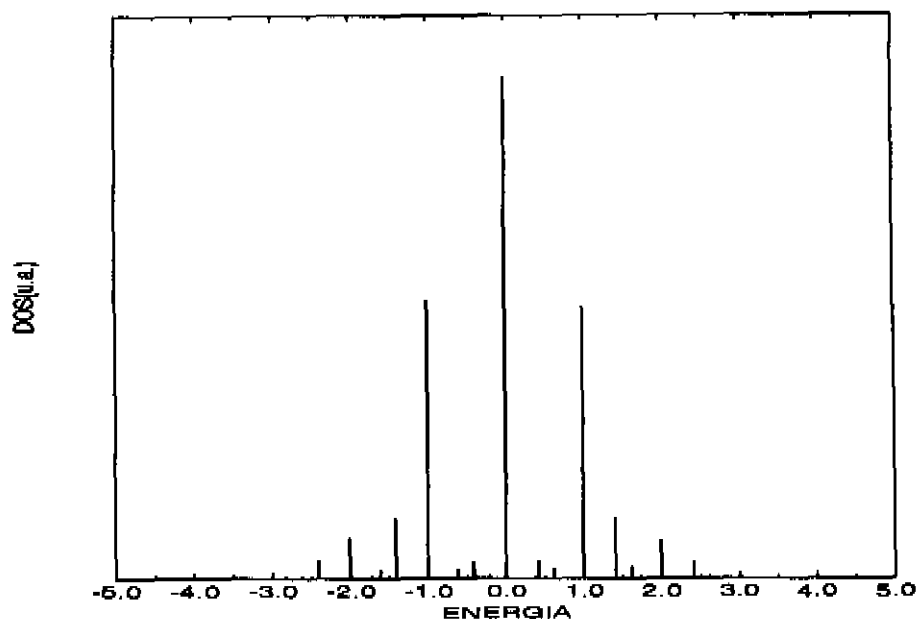


Fig. 3.5: Caso aleatório,  $\sigma_C = 0$ , com concentrações  $c_A = 0.2$  e  $c_B = 0.8$ .

rior, estando apenas representadas em escalas diferentes com a finalidade de melhor visualizarmos a diferença entre os 3 limites de correlação entre sítios vizinhos.

Com esses resultados, fica claro que a localização dos estados eletrônicos depende fortemente da ordem de curto alcance. Perto do limite segregado, nossos cálculos indicam a presença de estados não exponencialmente localizados. Nesse limite teríamos a formação de ilhas muito grandes da mesma espécie, fazendo com que o limite de percolação decresça. Evidências da presença de estados estendidos em sistemas desordenados bidimensionais foram obtidos por Schreiber (1991), analisando a natureza fractal da função de onda de amostras bidimensionais através da diagonalização direta de matrizes de até  $32000 \times 32000$ .

Em resumo, o método por nós proposto para calcular a DOS de sistemas bidimensionais, é bastante eficiente, permitindo determinar a estrutura de limites impor-

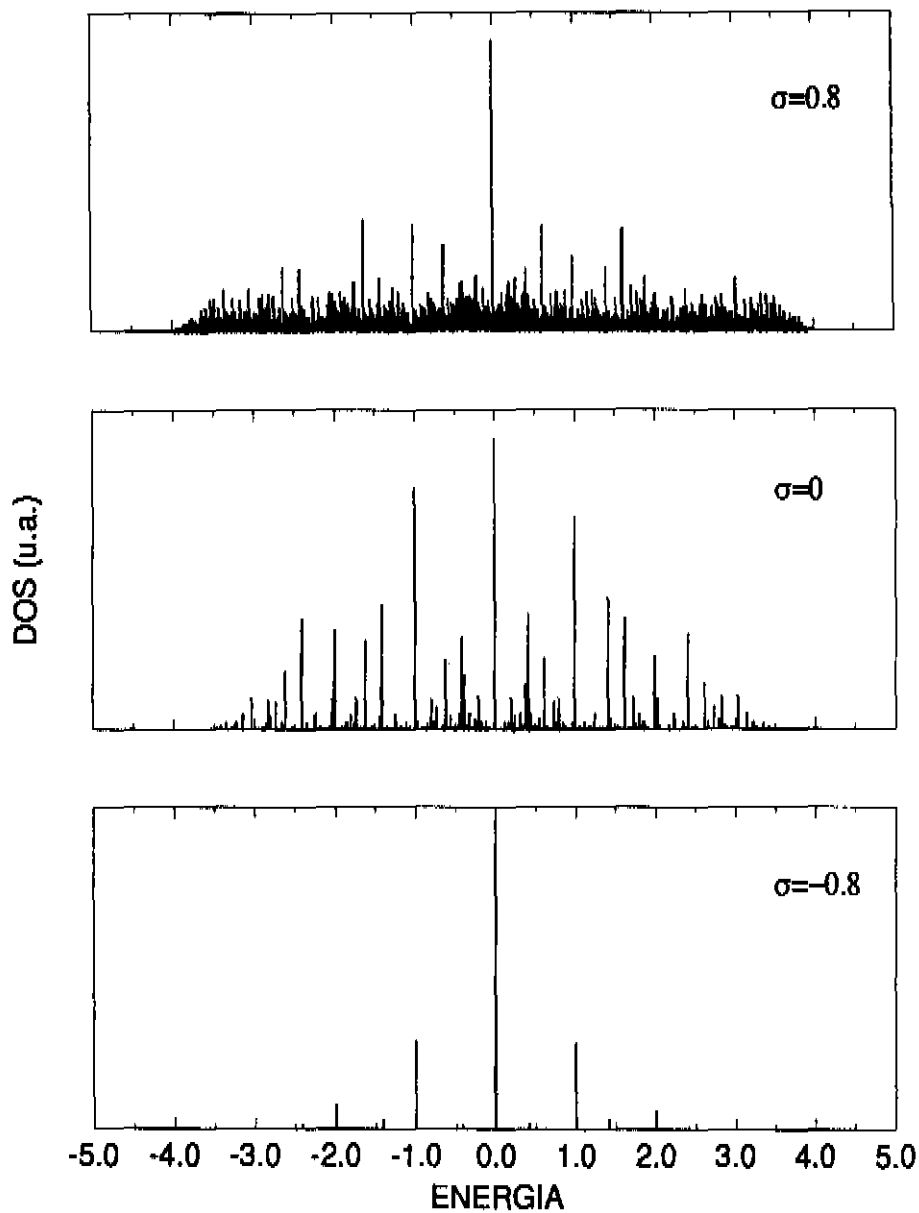


Fig. 3.6: DOS para limite bidimensional ( $N=20$  cadeias), a.)  $\sigma_C = -0.8$  - tendência à ordem, b.)  $\sigma_C = 0$  - desordem aleatória, c.)  $\sigma_C = 0.8$  - tendência à segregação, passo =  $5 \cdot 10^{-4}$ .

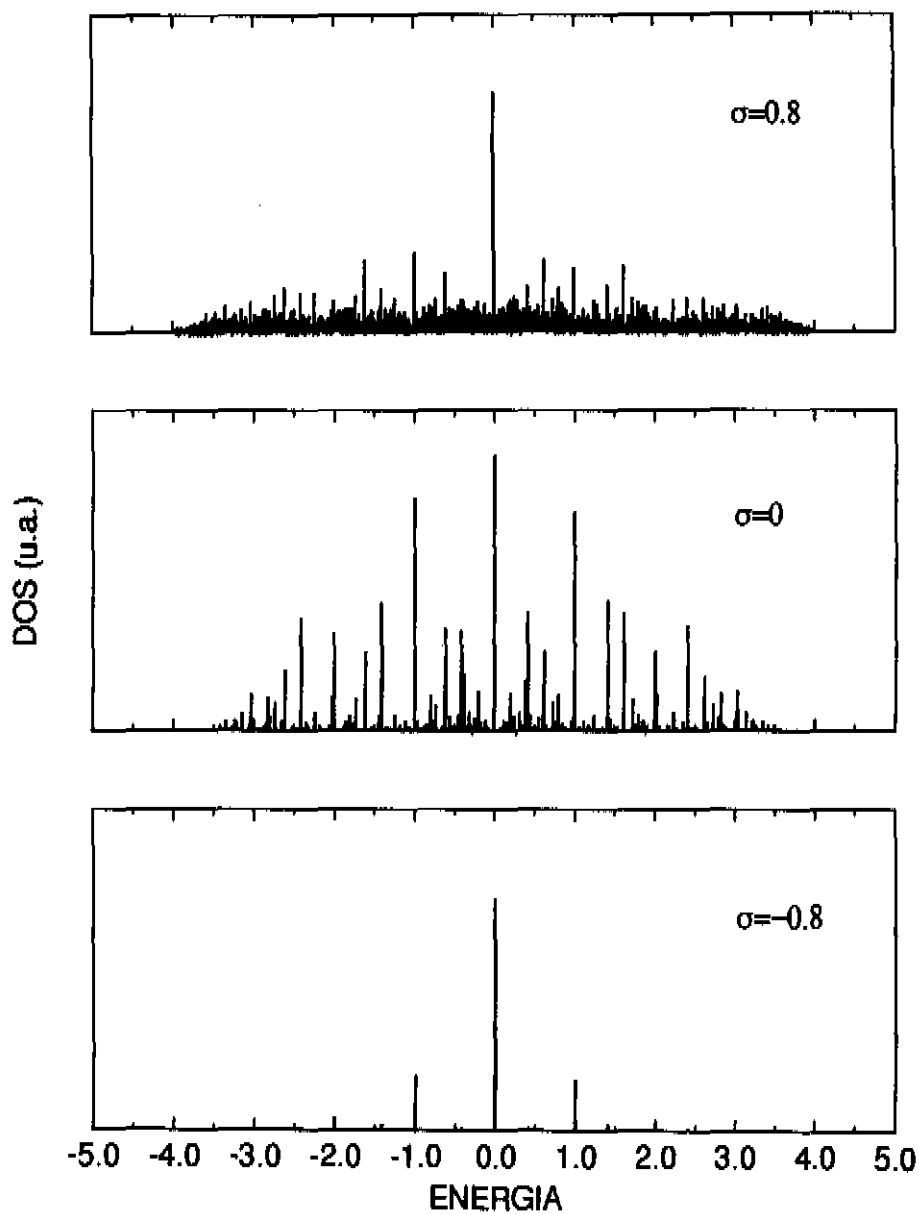


Fig. 3.7: DOS para limite bidimensional (convolução) indo do limite ordenado até segregação, passo  $=5 \cdot 10^{-4}$

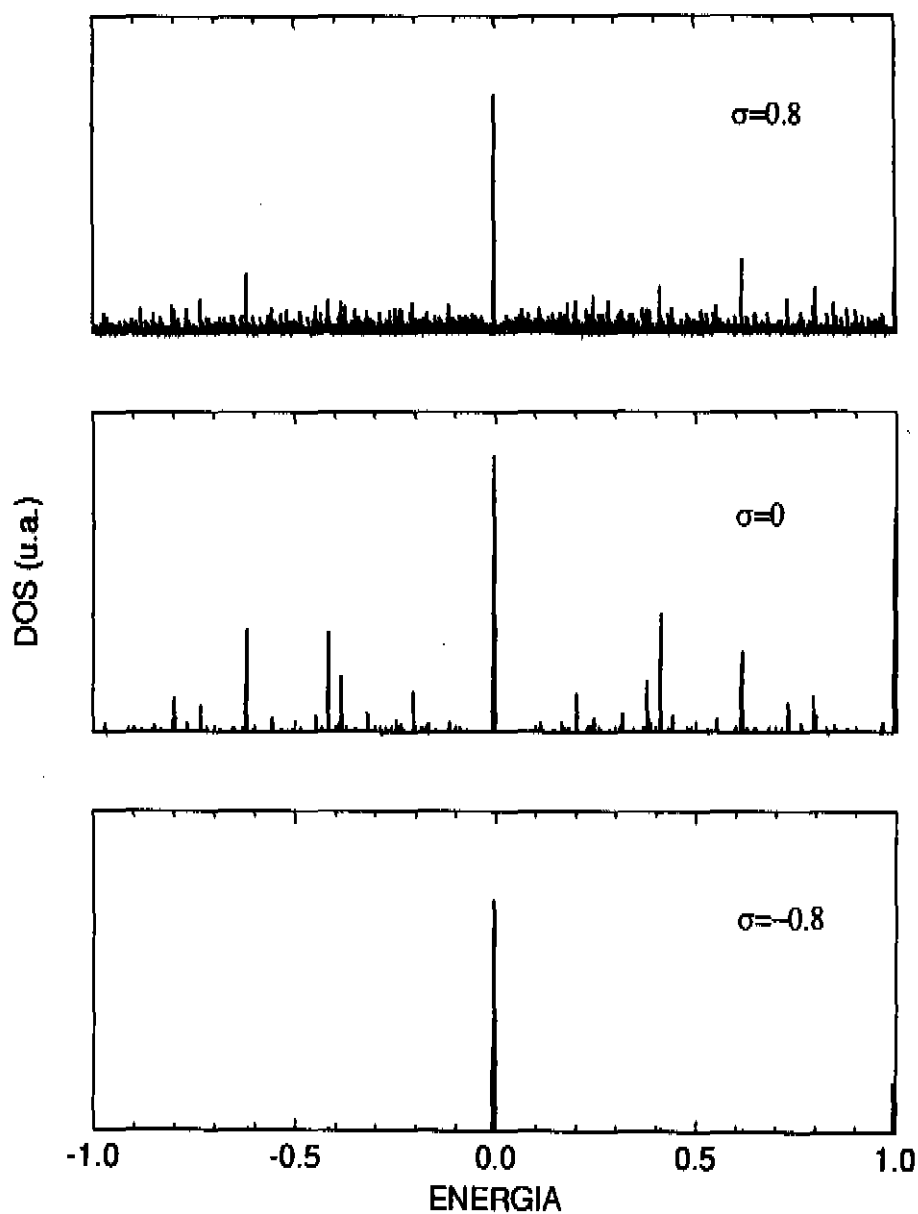


Fig. 3.8: DOS para limite bidimensional (convolução) indo do limite ordenado até segregação, passo  $=5 \cdot 10^{-4}$ , intervalo de energia de -1 à 1.

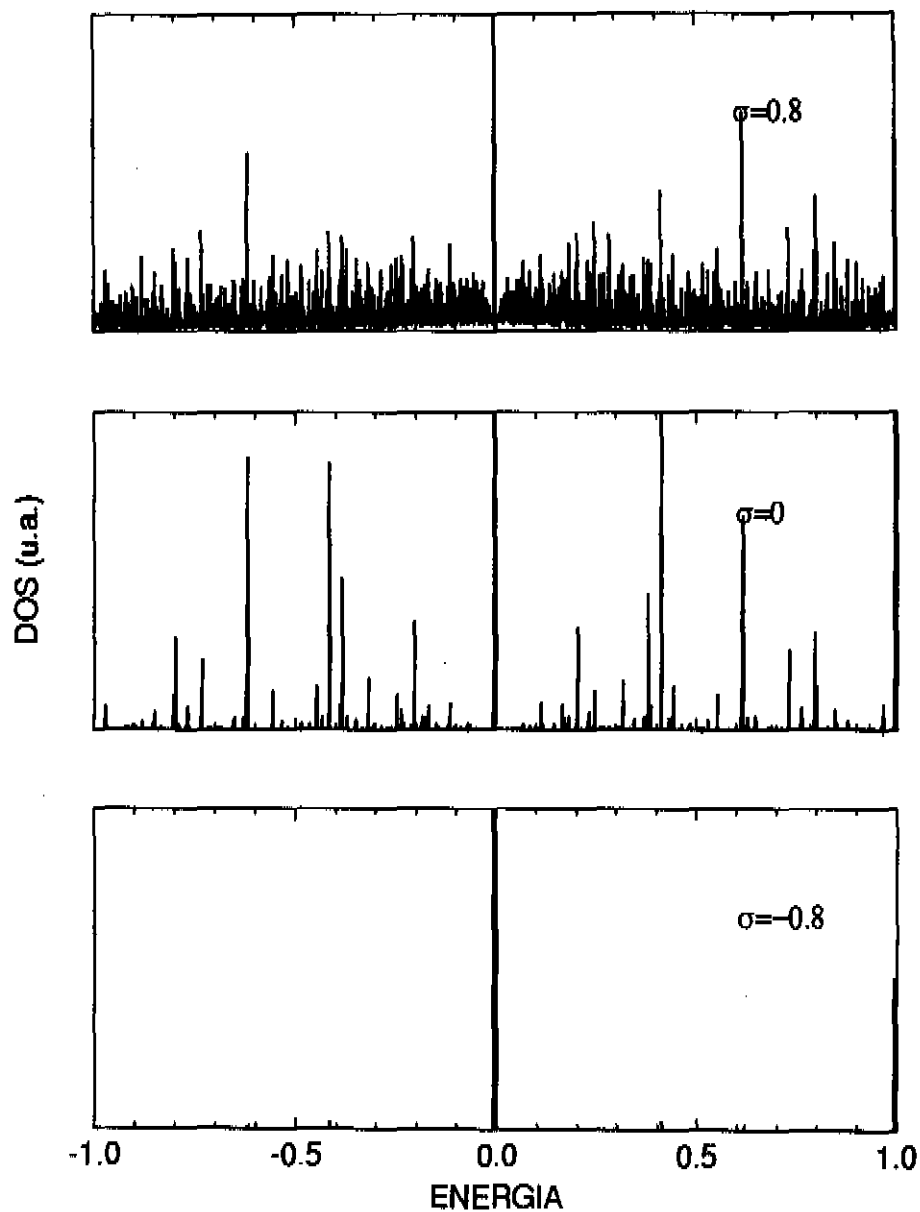


Fig. 3.9: DOS para limite bidimensional (convolução) indo do limite ordenado até segregação, passo  $=5 \cdot 10^{-4}$ , intervalo de energia de -1 à 1, cortando a singularidade central (1/3 da altura inicial)



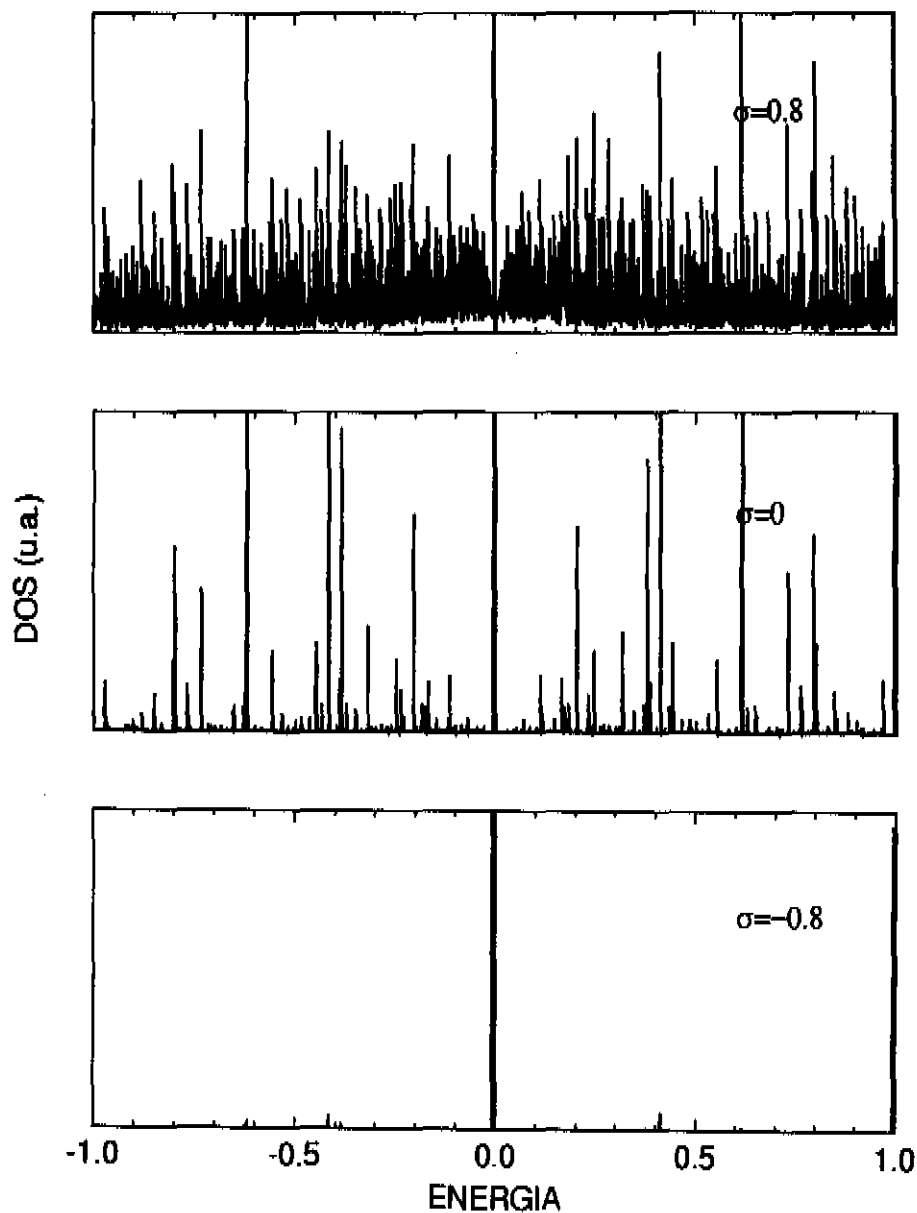


Fig. 3.10: DOS para limite bidimensional (convolução) indo do limite ordenado até segregação, passo  $\approx 5 \cdot 10^{-4}$ , intervalo de energia de -1 à 1, cortando a singularidade central (1/2 da altura anterior).

tantes, e analisar os efeitos de ordem de curto alcance (SRO) [6]. Pela primeira vez efeitos de SRO na localização dos estados eletrônicos são analisados e indicam forte dependência entre SRO e localização. Podemos observar que quando o sistema tende ao limite segregado (para concentrações iguais, a estrutura da DOS indica para a presença de estados não exponencialmente localizados para sistema bidimensional.

## Chapter 2. Efeitos do Campo Magnético na Localização dos Estados Eletrônicos para Sistemas Quasi-unidimensionais

Os sistemas quasi-unidimensionais estudados aqui tem a geometria de uma barra, como ilustra a figura 2.8. Condições de contorno periódicas são assumidas nas dimensões finitas  $x$  e  $y$ . O campo magnético é aplicado na direção  $z$ .

Este sistema é modelado de maneira análoga à introduzida no capítulo 2, por um hamiltoniano tipo Tight-Binding com interação apenas entre primeiros vizinhos  $i$  e  $j$ , para uma liga binária desordenada, no limite de percolação quântica. A diferença está em introduzir uma fase complexa no termo de "hopping", que está associada com o campo magnético, procedimento este conhecido como substituição de Peierls [69]:

$$\mathbf{H} = \sum_{\langle i \rangle} E_i |i\rangle \langle i| + \sum_{\langle ij \rangle} V e^{i\phi_{ij}} |i\rangle \langle j| + h.c., \quad (3.3)$$

onde a fase  $\phi_{ij}$  está associada com o campo magnético aplicado, e  $i$  e  $j$  denotam sítios primeiros vizinhos.

A amplitude da probabilidade de transição [68] entre dois sítios  $x$  e  $y$  de uma partícula quântica de carga  $e$ , quando está se movendo sobre a influência de um campo magnético  $\vec{B}$  é dada por:

$$V_{xy}(B) = V_{xy}(0) e^{i(e/c\hbar) \int_x^y \vec{A} \cdot d\vec{l}} \quad (3.4)$$

onde  $\vec{A}$  é o vetor potencial relacionado com o campo magnético  $\vec{B}$  por  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ .

Quando o caminho é fechado, a integral pode ser expressa como:

$$\frac{e}{\hbar c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{e}{\hbar c} \int \int \vec{B} \cdot d\vec{s} = 2\pi \frac{e}{\hbar c} \Phi = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (3.5)$$

onde  $\Phi$  é o fluxo magnético através da área encerrada pela trajetória do elétron, e  $\Phi_0$  corresponde ao quantum de fluxo.

Como o que interessa é a diferença de fase global numa trajetória fechada, assumimos que na horizontal o termo de “hopping”  $Ve^{i\phi_{ij}}$  é sempre real e igual a  $V$ , ou seja  $\phi_{ij} = 0$ . Na vertical tomamos  $Ve^{i\phi_{ij}}$  para cada ligação de maneira que o fluxo que atravessa a seção de cada quadrado seja o mesmo, ou seja o campo magnético é uniforme. Assim para uma seção de  $N \times M = 12$ , temos no caso de condições de contorno periódicas, que satisfazer a relação:

$$\phi_1 = \phi_1 + 6\Phi, \text{Mod}[2\pi] \quad (3.6)$$

o que significa tomar:

$$6\Phi = 2\pi n, n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.7)$$

onde  $\phi_i$  representa a fase na  $i$ -ésima ligação vertical, e  $\Phi$  é o próprio fluxo dentro de uma célula quadrada. Os valores de  $\Phi$  ficam então restritos a:

$$\Phi = \frac{\pi}{3}n \quad (3.8)$$

com  $n$  igual a um inteiro.

A DOS para o sistema com a geometria de uma barra é obtida segundo método proposto no capítulo 2:

$$\mathcal{D}_{barra}(E) = \sum_C P_C \sum_{i=1}^{M \times N} d_s^{(C)}(E_i) \mathcal{D}_{1dim}(E - E_i), \quad (3.9)$$

onde  $d_s(E_i)$  representa a distribuição dos autovalores  $E_i$  de uma seção transversal de dimensão  $M \times N$ , com  $M$  e  $N$  finitos.  $\mathcal{D}_{1dim}(E - E_i)$  é a DOS de cadeias lineares centradas nos autovalores  $E_i$  e  $P_C$  a probabilidade de cada configuração para a seção transversal.

### 3.1 Caso Desordenado

Para o caso desordenado, se estamos interessados em nos aproximar da situação real, onde os átomos não se distribuem de maneira aleatória, mas dependem da ocupação de sítios vizinhos, alguma aproximação para se levar em conta essas correlações deve ser feita. Nesse caso temos configurações com diferentes probabilidades de ocorrerem, distinto do que ocorre no caso aleatório, onde todas as configurações tem a mesma probabilidade de ocorrerem.

#### 3.1.1 Aproximação de Kikuchi de Quadrados

Uma maneira eficiente de levar em consideração as correlações entre sítios no caso de uma rede quadrada, ou genericamente para a geometria de faixas é através da aproximação de Kikuchi de quadrados [34]. A vantagem de se introduzir as correlações de curto alcance através de quadrados, (e não por exemplo através de pares como feito anteriormente para o caso de uma cadeia na transversal), é que assim a topologia do sistema fica representada de maneira mais precisa, ou seja, o fato de ocorrerem

trajetórias fechadas está sendo considerado através da introdução da correlação de quadrados.

Para cada quadrado temos 16 configurações possíveis de ocorrerem, sendo que algumas são degeneradas. Ilustramos estas configurações e suas respectivas probabilidades  $z'_i$ s e degenerescências na figura 4.3.

No caso da aproximação de pares que utilizamos no capítulo 2 para levar em conta as correlações de curto alcance, tínhamos dois parâmetros independentes que eram a concentração de uma das espécies  $c_i$  e o parâmetro de Cowley  $\sigma_C$ . No caso de considerarmos a aproximação de quadrados necessitamos de 5 parâmetros independentes. Essas cinco variáveis independentes podem ser convenientemente escolhidas como sendo:  $p_{AB}$ ,  $z_3$ ,  $z_4$ ,  $\xi_1$  e  $\xi_2$ , sendo as últimas duas definidas como:

$$\xi_1 = c_A - c_B \quad (3.10)$$

$$\xi_2 = z_2 - z_5, \quad (3.11)$$

O primeiro parâmetro  $p_{AB}$ , que dá a probabilidade de ocorrer um par  $AB$ , representa a ordem de curto alcance através da sua dependência com o parâmetro de Cowley  $\sigma_C$ , segundo a relação:

$$\sigma_C = 1 - \frac{p_{AB}}{2c_A c_B}. \quad (3.12)$$

Usando a condição de normalização :

$$c_A + c_B = 1, \quad (3.13)$$

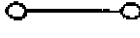


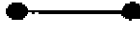
LIG.	PROB.	DEG.
	$P_{AA}$	1
 	$P_{AB}$	2
	$P_{BB}$	1

Fig. 3.11: Probabilidades das configurações de uma ligação

com:

$$p_{AA} + p_{AB} = c_A \quad (3.14)$$

$$p_{BB} + p_{AB} = c_B \quad (3.15)$$

e as relações que conectam geometricamente as probabilidades de quadrados e as probabilidades de pares :

$$p_{AA} = z_1 + 2z_2 + z_3 \quad (3.16)$$

$$p_{AB} = z_2 + z_3 + z_4 + z_5 \quad (3.17)$$

$$p_{BB} = z_3 + 2z_5 + z_6 \quad (3.18)$$

As variáveis dependentes podem ser expressas como:

$$c_A = (1 + \xi_1)/2$$

$$c_B = (1 - \xi_1)/2$$

$$p_{AA} = (1 + \xi_1 - 2p_{AB})/2$$

$$p_{BB} = (1 - \xi_1 - 2p_{AB})/2$$

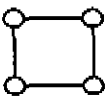
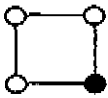
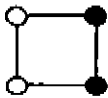
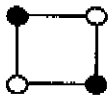
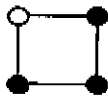
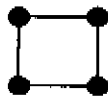
QUADRADO	PROB.	DEG.
	$z_1$	1
	$z_2$	4
	$z_3$	4
	$z_4$	2
	$z_5$	4
	$z_6$	1

Fig. 3.12: Probabilidades das configurações de um quadrado



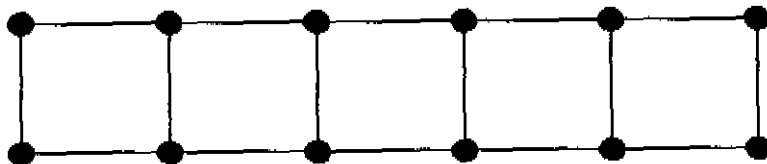


Fig. 3.13: Faixa de largura  $M = 2$  e comprimento  $N = 6$ .

$$z_1 = (1 + \xi_1 - 4p_{AB} + 2z_4 - 2\xi_2)/2 \quad (3.19)$$

$$z_2 = (p_{AB} - z_3 - z_4 + \xi_2)/2$$

$$z_5 = (p_{AB} - z_3 - z_4 - \xi_2)/2$$

$$z_6 = (1 - \xi_1 - 4p_{AB} + 2z_4 + 2\xi_2)/2$$

Variando-se os parâmetros  $p_{AB}$ ,  $\xi_1$ ,  $\xi_2$ ,  $z_3$  e  $z_4$  estudamos os casos indo desde o limite ordenado passando pela desordem completamente aleatória até atingir o limite segregado.

A probabilidade de cada configuração PC (para uma faixa como ilustra a figura 4.4) é dada em termos das probabilidades dos quadrados  $P_{Qi}$  (que correspondem as probabilidades  $z_i$ 's) e das probabilidades das ligações  $P_{Li}$  (que correspondem a probabilidades de pares  $p_{ij}$  na vertical) :

$$PC = \frac{p_{Q1} \cdot p_{Q2} \cdot p_{Q3} \cdots p_{QN}}{p_{L1} \cdot p_{L2} \cdot p_{L3} \cdots p_{L(N-1)}} \quad (3.20)$$

Os casos ilustrados a seguir correspondem ao limite de percolação quântica, onde temos a formação de duas bandas separadas, uma centrada em  $E_A = 0$  e outra em  $E_B = 1000$ . Tomamos  $V = 1$  e  $c_A = c_B = 0.5$ .

Para o caso da **desordem aleatória**, onde a ocupação dos sítios é independente, temos para concentrações iguais ( $c_A = c_B = 0.5$ ), os seguintes valores para os

parâmetros independentes:  $p_{AB} = 1/4$  ( $\sigma_C = 0$ ),  $z_3 = z_4 = 1/16$ ,  $\xi_1 = 0$  e  $\xi_2 = 0$ .

As probabilidades de quadrados  $z_i$ 's são todas iguais,  $z_i = 1/16$ . Podemos observar que a estrutura da DOS nesse caso é típica de estados localizados (figura 4.5).

Quando o sistema apresenta **tendência à segregação**, no limite onde as duas espécies tem energias muito separadas ( que corresponde ao caso estudado de percolação quântica), temos o aparecimento de duas subbandas com características de um sistema puro. O limite que estudamos corresponde a tomar os parâmetros independentes como:  $\sigma_C = 0.8$ ,  $z_3 = 0$ ,  $z_4 = 0$ ,  $\xi_1 = 0$  e  $\xi_2 = 0$ . Nesse limite a DOS apresenta uma estrutura que indica a presença de estados não exponencialmente localizados (figura 4.6).

Estudamos o caso em que o sistema apresenta **tendência à ordem** para os seguintes valores de parâmetros independentes:  $\sigma_C = -0.8$ . Para  $c_A = c_B = 0.5$ ,  $p_{AB} = 0.45$ ,  $z_3 = 0.05$ ,  $z_4 = 0.4$ ,  $\xi_1 = 0$  e  $\xi_2 = 0$ . Nesse limite temos duas pseudoredes se intercalando. Como as energias de cada uma das duas espécies são muito distintas, uma forte localização dos estados eletrônicos é observada como esperado (figura 4.7).

As figura 4.5, 4.6 e 4.7 correspondem a DOS para os casos aleatório, tendência à segregação e tendência à ordem, para os parâmetros anteriormente definidos para a liga binária, na ausência de campo magnético. Para cada figura ilustramos os casos para seções finitas com  $N \times M = 12, 16$  e a convolução da DOS bidimensional com a DOS unidimensional. Podemos observar que mesmo para sistemas com seção transversal finita e da ordem de 12 átomos, a estrutura da DOS já mostra as características

essenciais do sistema infinito.

Esses efeitos de tamanho são esperados, uma vez que uma das dimensões do sistema é infinita, ou seja estamos tratando de geometria tipo cilíndrica, e nesse caso o sistema se aproxima muito mais rapidamente do limite infinito, do que se estivessemos tratando com clusters, onde todas as dimensões são tomadas finitas.

Na figura 4.8 ilustramos os três casos: (a) tendência à ordem, (b) desordem aleatória, (c) tendência à segregação, para o caso da convolução da DOS bidimensional com a DOS unidimensional. A figura 4.9 corresponde a ilustração dos mesmos três limites anteriores, mas com a convolução da distribuição dos autovalores da seção transversal finita ( $N \times M=12$ ) (no lugar da DOS bidimensional) com a DOS unidimensional.

Nas figuras 4.9 e 4.10 ilustramos os mesmos casos ilustrados na figura 4.9, mas com o passo de energia menor, igual à  $5 \cdot 10^{-4}$ . Enquanto com uma resolução menor, pode-se apreciar a estrutura global da DOS, uma varredura mais fina no espaço de energia é útil para observação de detalhes.

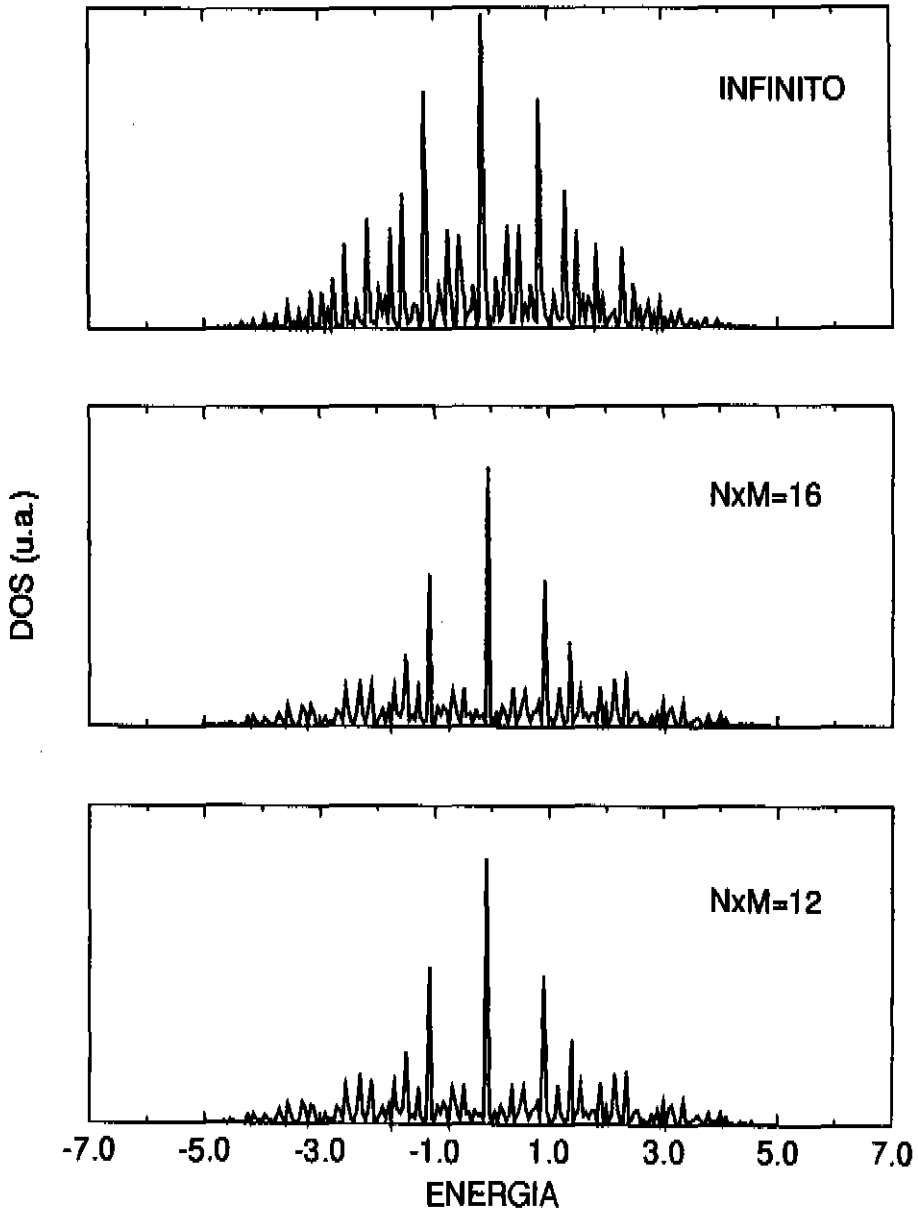


Fig. 3.14: DOS para rede cúbica - caso aleatório, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

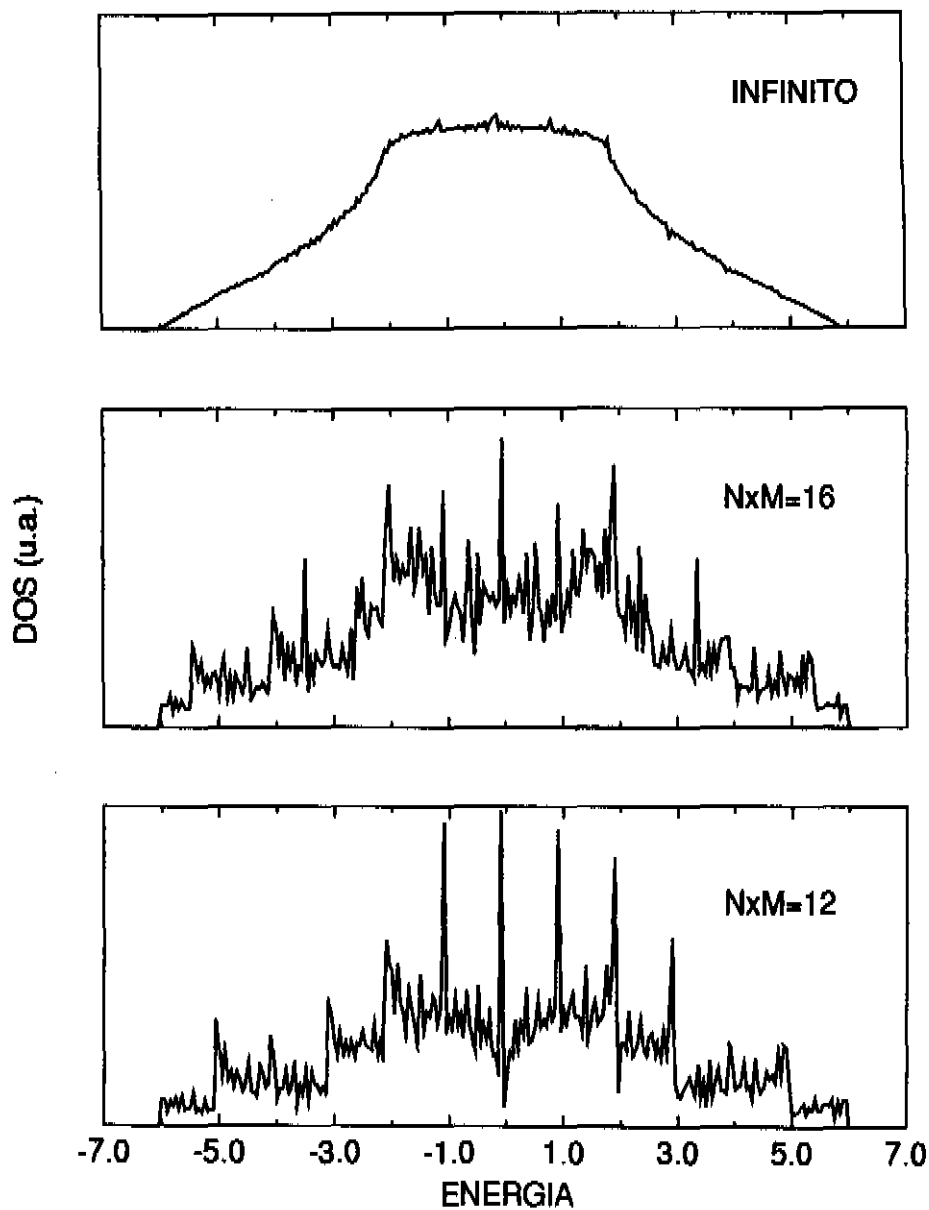


Fig. 3.15: DOS para rede cúbica - tendência à segregação, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

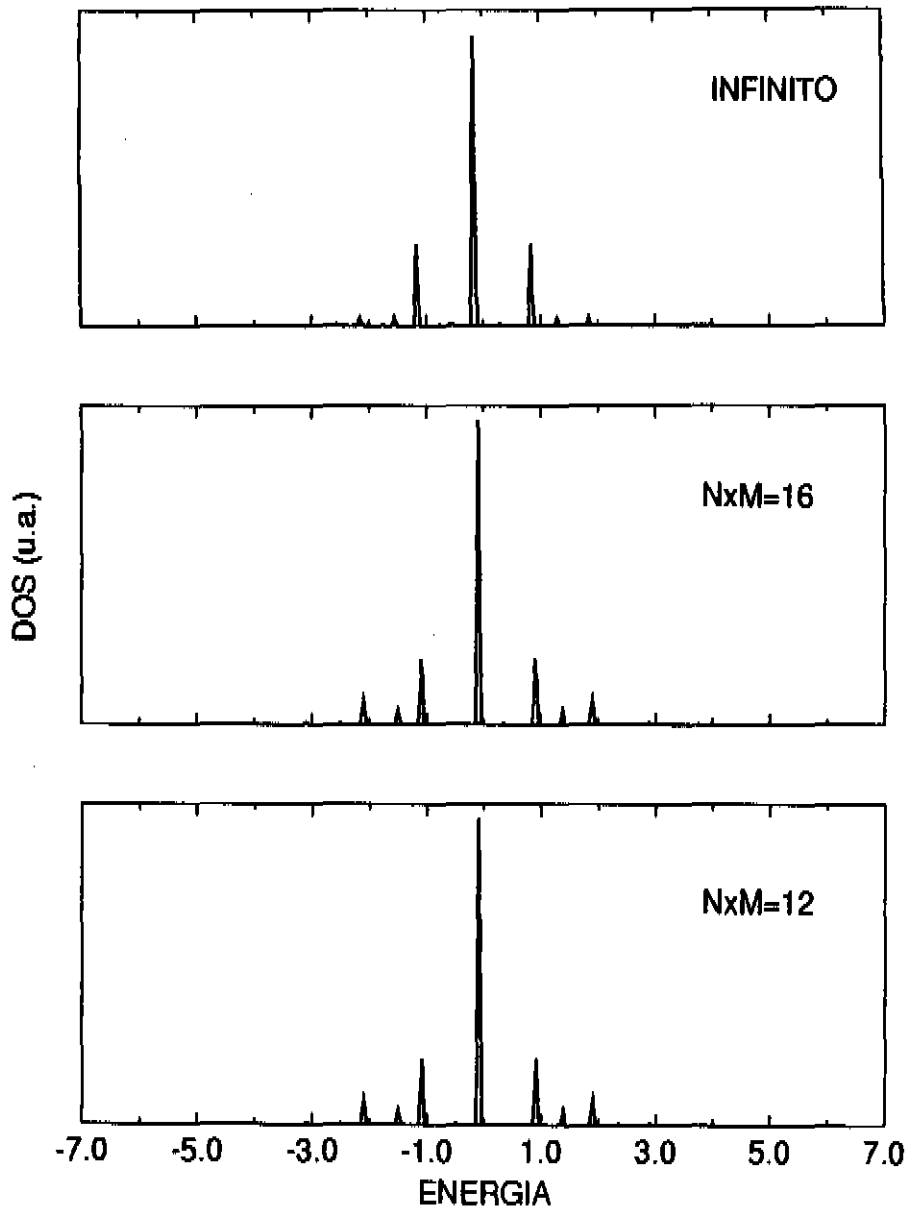


Fig. 3.16: DOS para rede cúbica - tendência à ordem , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

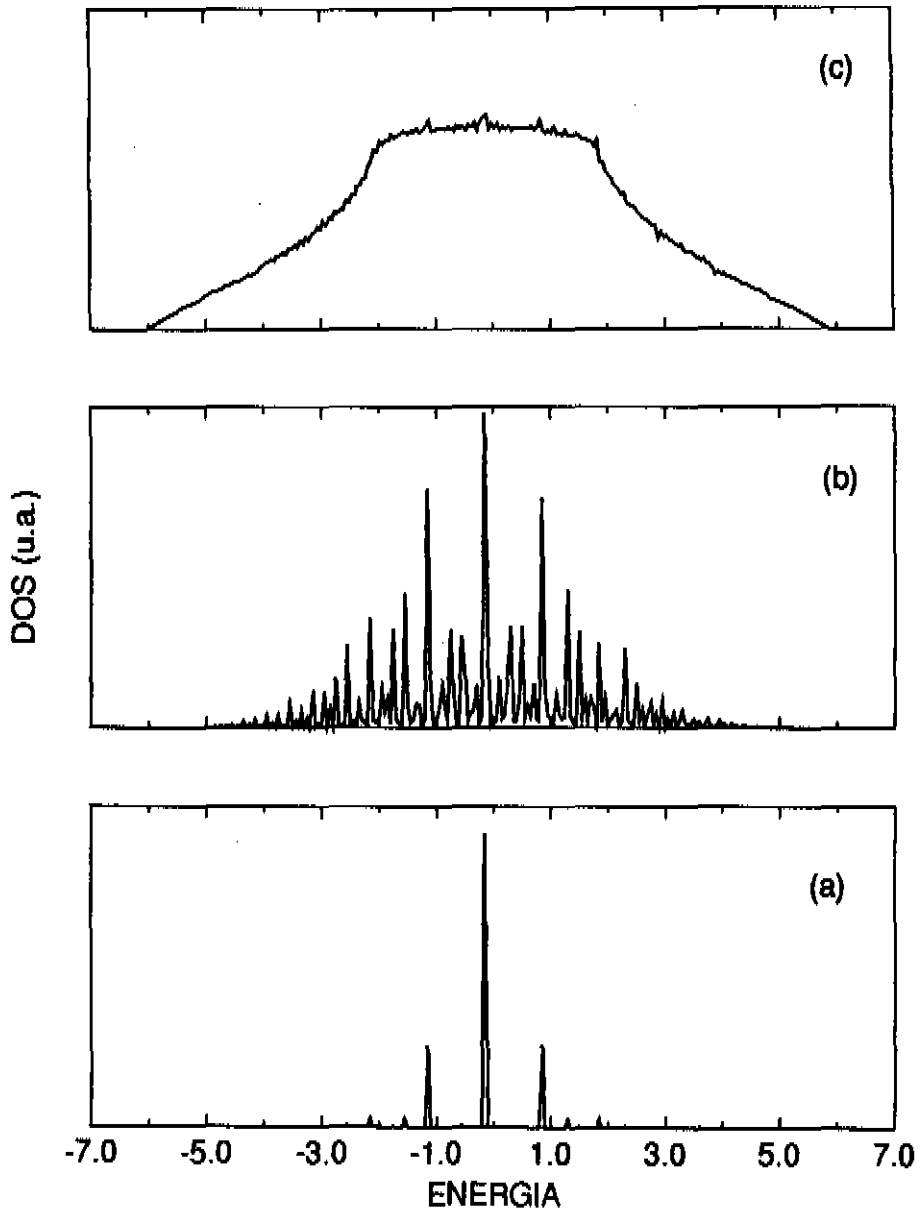


Fig. 3.17: DOS para rede cúbica - sistema infinito, (a) tendência à ordem, (b) desordem aleatória, (c) tendência à segregação, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

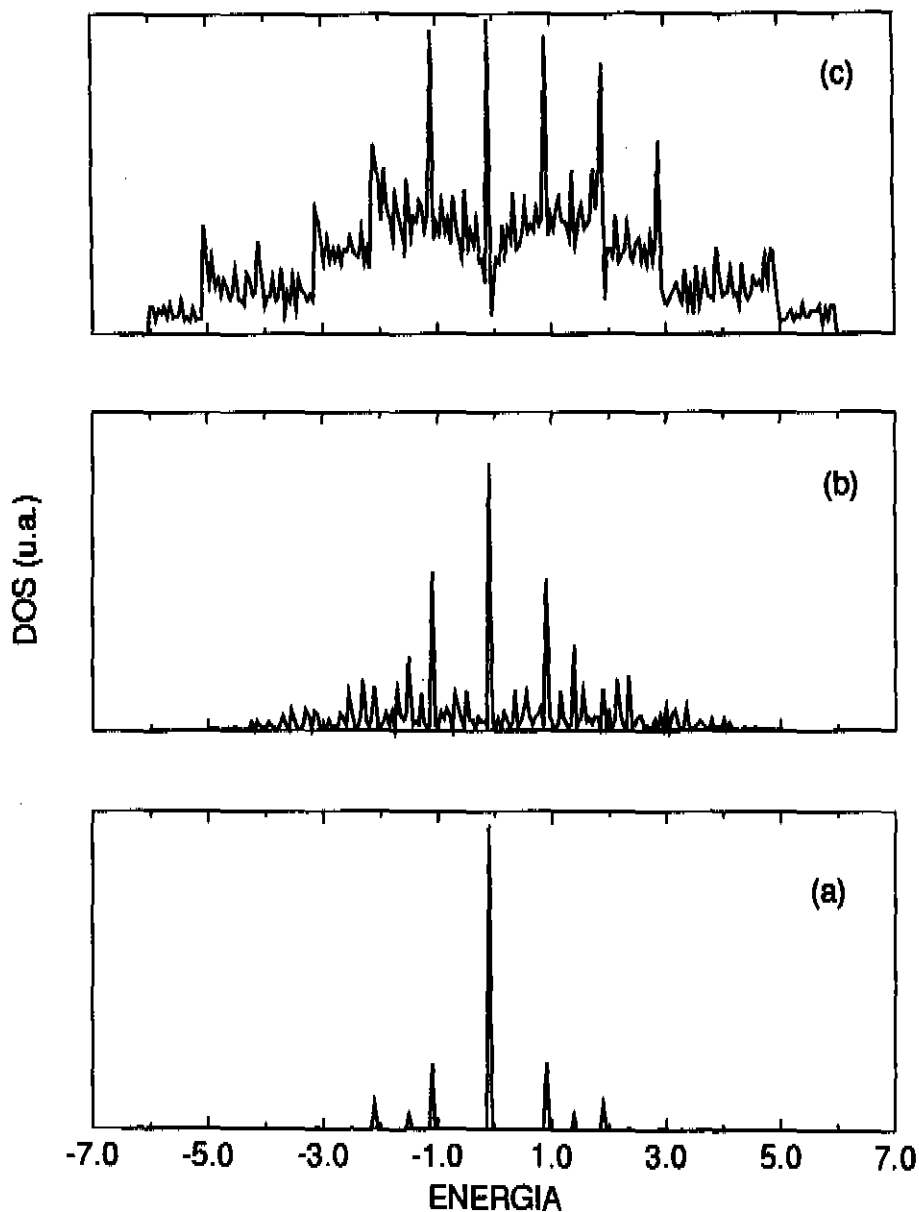


Fig. 3.18: DOS para rede cúbica, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , (a) tendência à ordem, (b) desordem aleatória, (c) tendência à segregação, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .



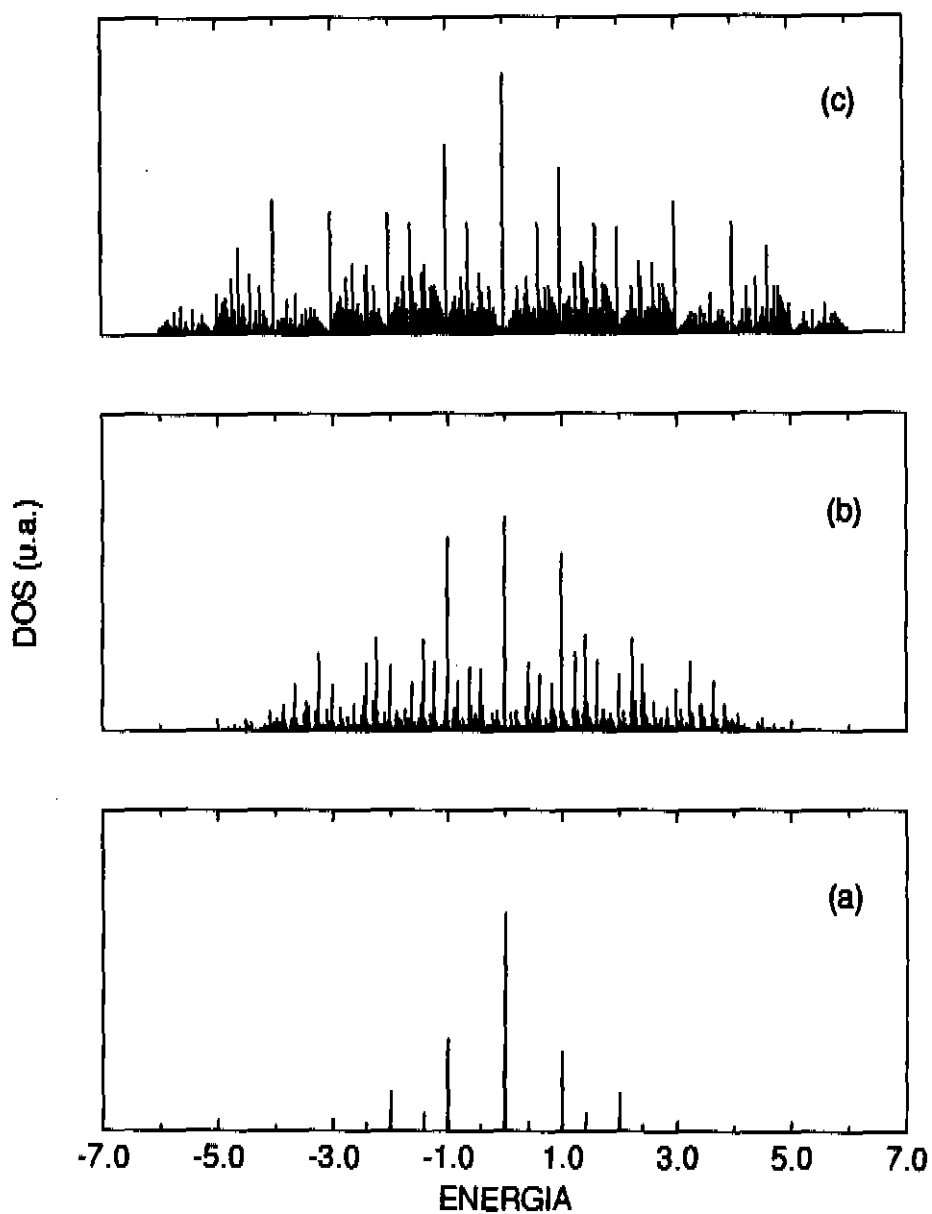


Fig. 3.19: DOS para rede cúbica, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , (a) tendência à ordem, (b) desordem aleatória, (c) tendência à segregação, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

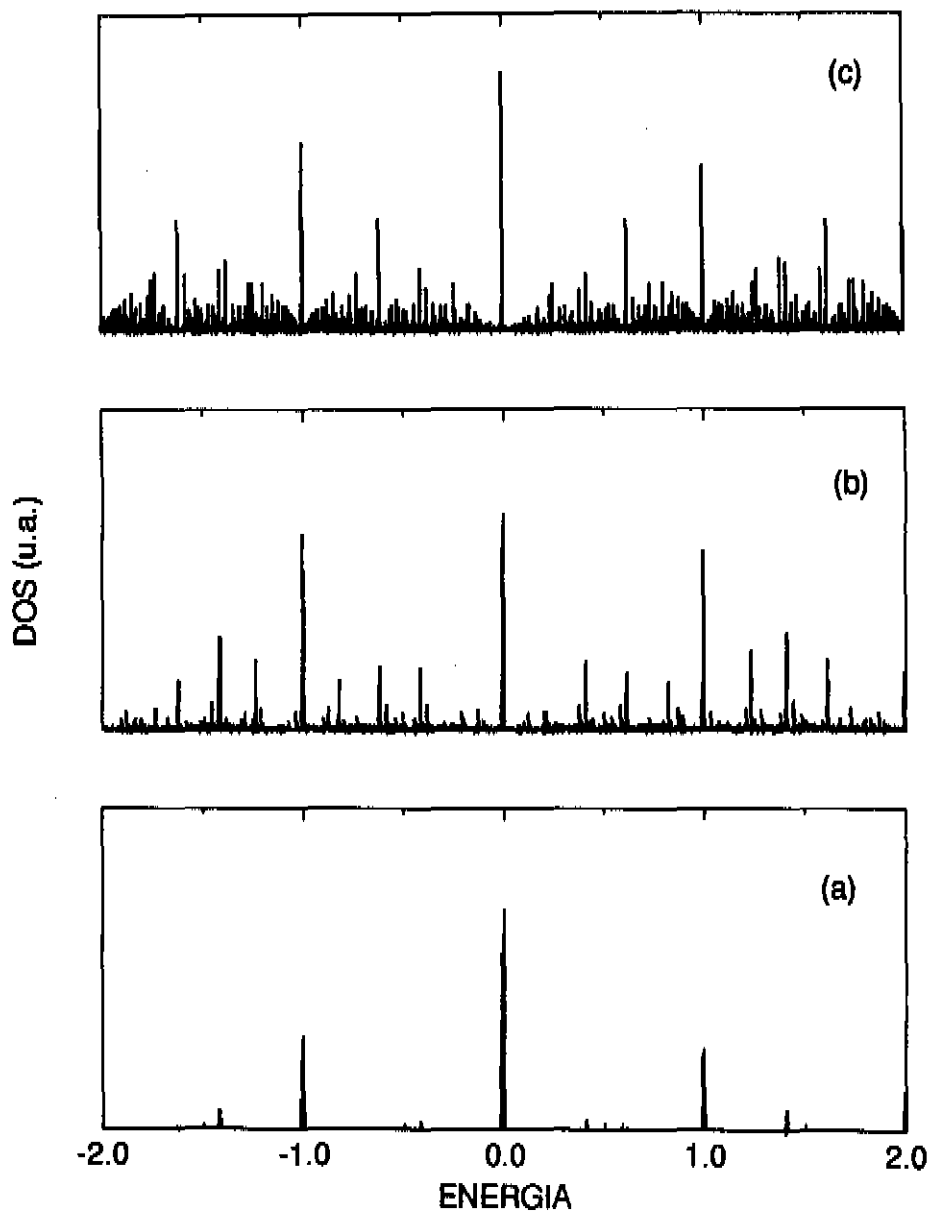


Fig. 3.20: DOS para rede cúbica -  $N \times M=12$ , (a) tendência à ordem, (b) desordem aleatória, (c) tendência à segregação, intervalo de energia reduzido, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

Nas figuras que se seguem mostramos os resultados obtidos na presença de campo magnético. Tomamos 4 valores para o fluxo  $\Phi$ ,  $0$ ,  $\frac{\pi}{3}$ ,  $\frac{2\pi}{3}$  e  $\pi$ . Quando  $\Phi = 0$ , temos ausência de campo magnético, e os resultados correspondem aos anteriormente ilustrados.

As figuras 4.11, 4.12 e 4.13 ilustram os efeitos do campo magnético para os casos de desordem aleatória, tendência à segregação e tendência à ordem respectivamente. Esses exemplos correspondem ao caso de menor resolução, onde o passo de energia foi tomado como  $5 \cdot 10^{-2}$ . Observamos que perto da segregação, o sistema se mostra mais sensível ao efeito da aplicação do campo magnético.

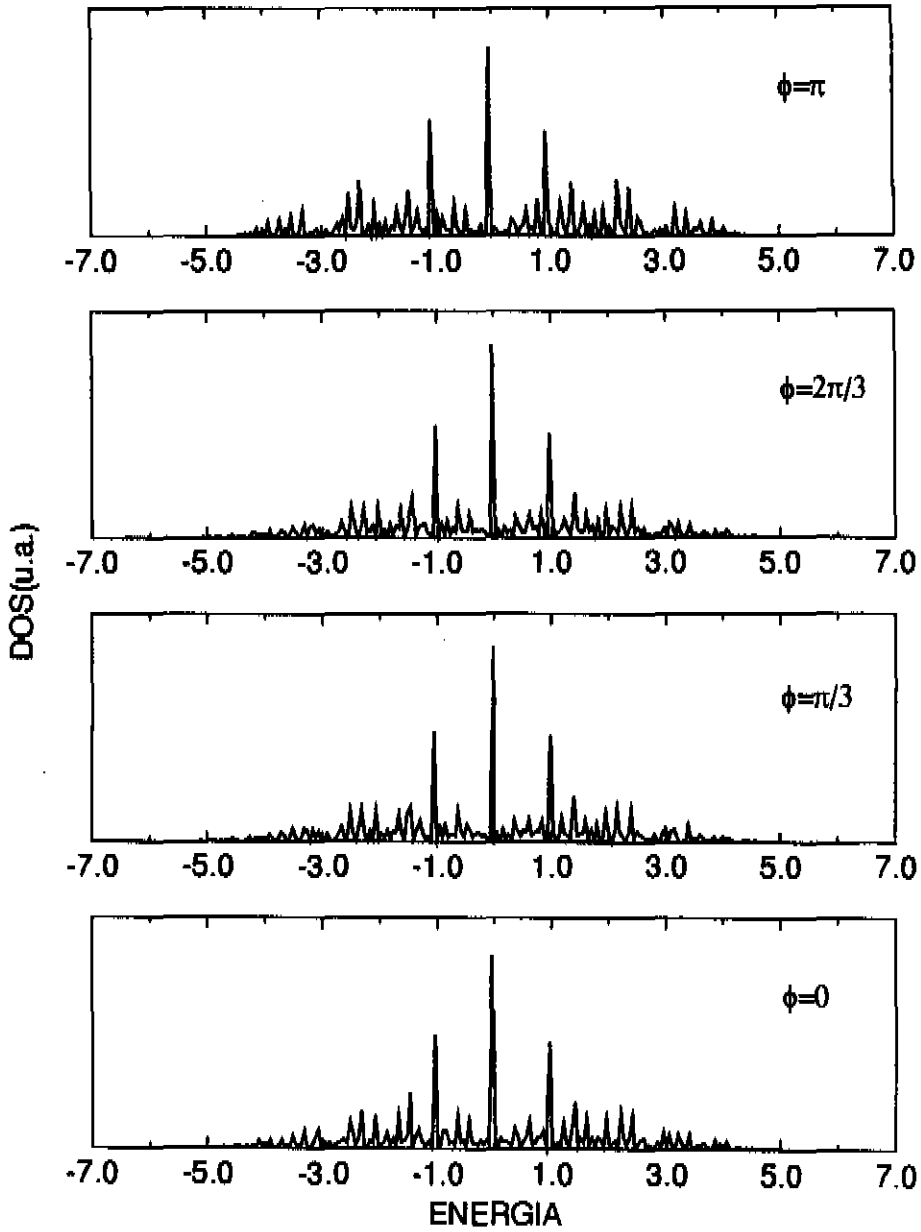


Fig. 3.21: DOS para rede cúbica - efeito do campo magnético  $N \times M=12$ , desordem aleatória, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

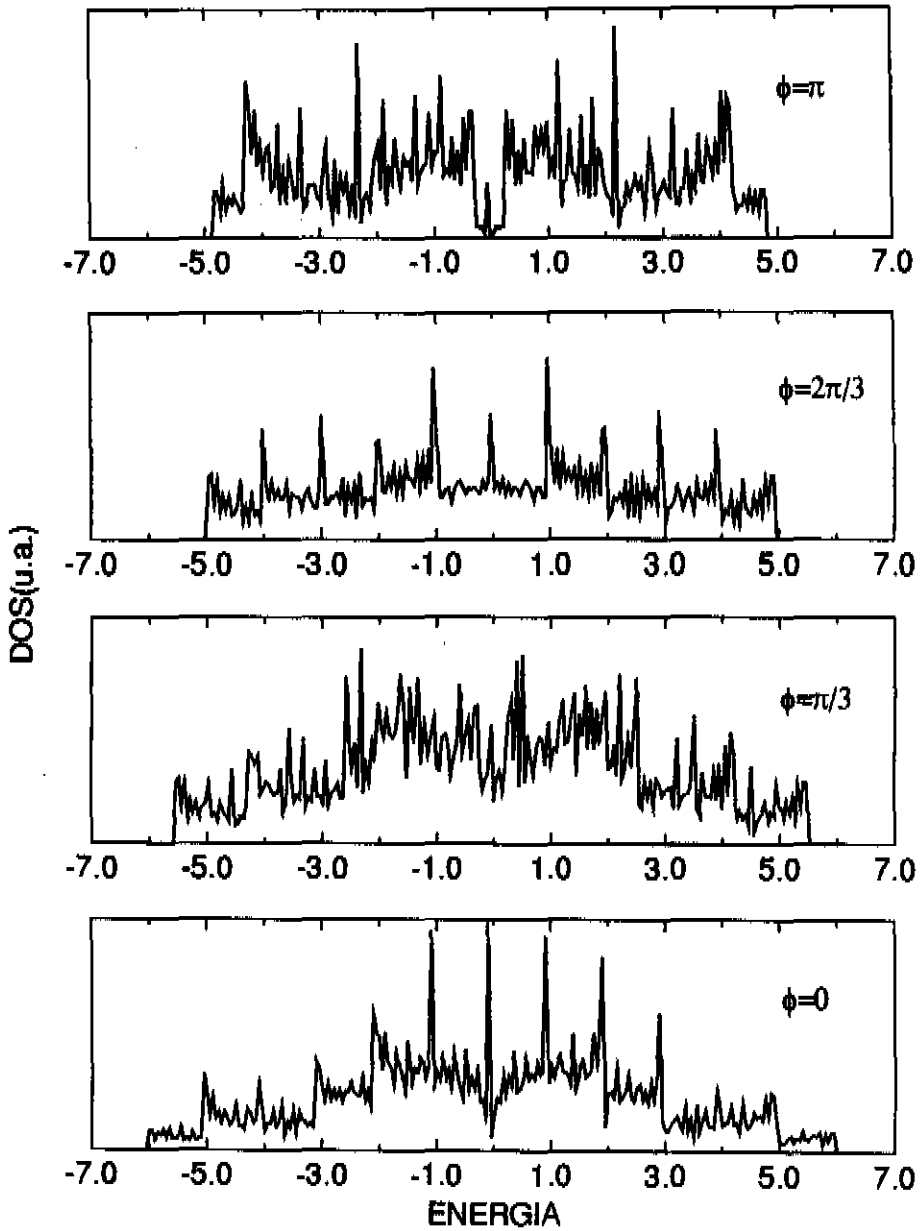


Fig. 3.22: DOS para rede cúbica - tendência à segregação, efeito do campo magnético, amostra de seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

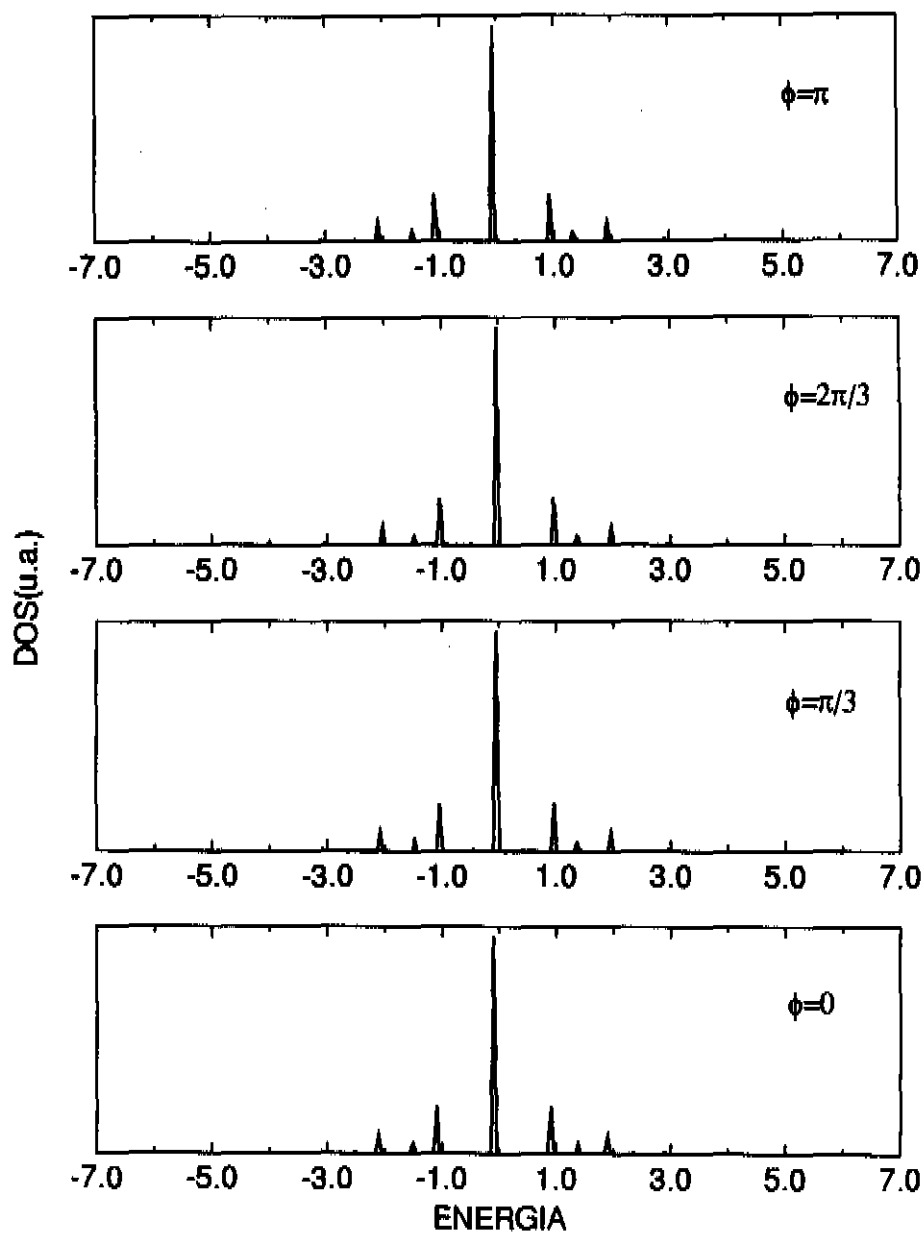


Fig. 3.23: DOS para rede cúbica - tendência à ordem, efeito do campo magnético, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-2}$ .

Nas figuras 4.14, 4.15 e 4.16 ilustramos os resultados obtidos para o caso de **desordem aleatória**, com o passo de energia igual à  $5 \cdot 10^{-4}$ . Enquanto que a figura 4.14 representa toda a estrutura da DOS, as figuras 4.15 e 4.16 corresponde a olharmos para a DOS para intervalos de energia reduzidos (4.15 e 4.16), e um corte na altura dos picos (4.16). Uma variação muito pequena da estrutura da DOS ocorre em função da variação do campo magnético. Para esse tipo de desordem, o que observa-se é que os estados eletrônicos permanecem sempre localizados para qualquer valor de campo. A variação que se observa, é a da largura da banda em função do campo magnético aplicado. diminuição da largura da banda está associada com efeitos de interferência quântica destrutiva.

Podemos observar (figuras 4.17, 4.18, 4.19 e 4.20) que quando o sistema se aproxima do **limite segregado**, a estrutura da DOS é extremamente sensível à aplicação do campo magnético. A primeira mudança visível (figuras 4.17 e 4.12) ocorre na largura da banda como observamos no caso anterior para desordem aleatória, associada com interferência quântica destrutiva, responsável neste caso também pelo aparecimento do “gap” no centro da banda para  $\Phi = \pi$ . Um comportamento oscilatório da DOS em função do campo é observado (figuras 4.18, 4.19 e 4.20). Esse comportamento oscilatório é associado com o efeito Aharonov-Bohm [24] e já foi observado experimentalmente para cilindros de Mg [12] (ver capítulo 1). Esse comportamento oscilatório de deslocalização-localização dos estados eletrônicos em função do campo aplicado é uma observação extremamente relevante, mostrando analogia com o Efeito Hall Quântico.

No outro extremo quando o sistema apresenta **tendência à ordem** conforme podemos observar nas figuras 4.21 e 4.22, a DOS permanece praticamente insensível frente as variações do campo magnético. Nesse caso os estados eletrônicos permanecem fortemente localizados, independentemente do campo aplicado.

Na figura 4.23 mostramos os resultados obtidos para  $c_A = 0.8$  e  $c_B = 0.2$  quando sistema apresenta desordem aleatória. Esse limite se assemelha ao limite de segregação quando temos as mesmas concentrações para ambas as espécies. Podemos ver que novamente a estrutura da DOS é sensível ao campo magnético aplicado.



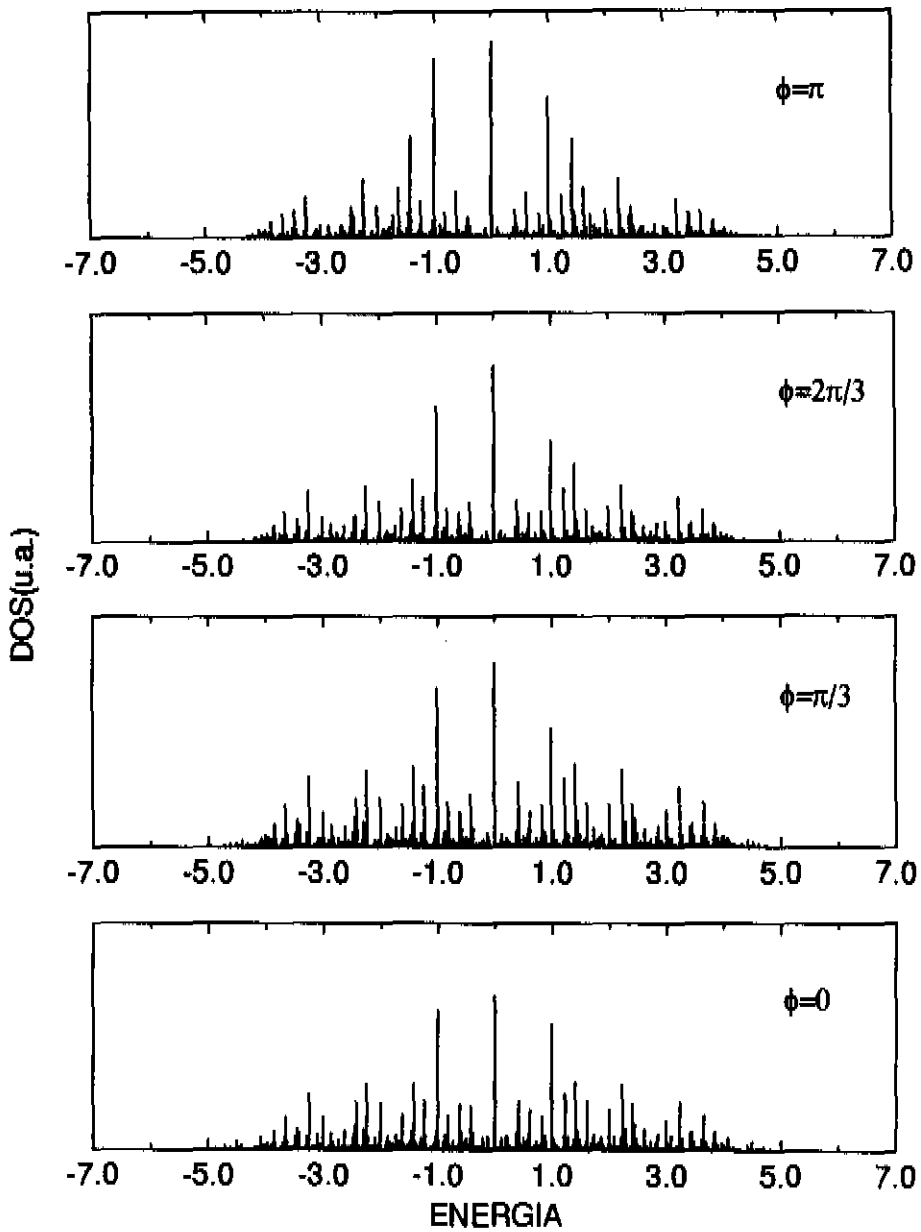


Fig. 3.24: DOS para rede cúbica - desordem aleatória, efeito do campo magnético, seção transversal de dimensão  $N \times M=12$ , , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

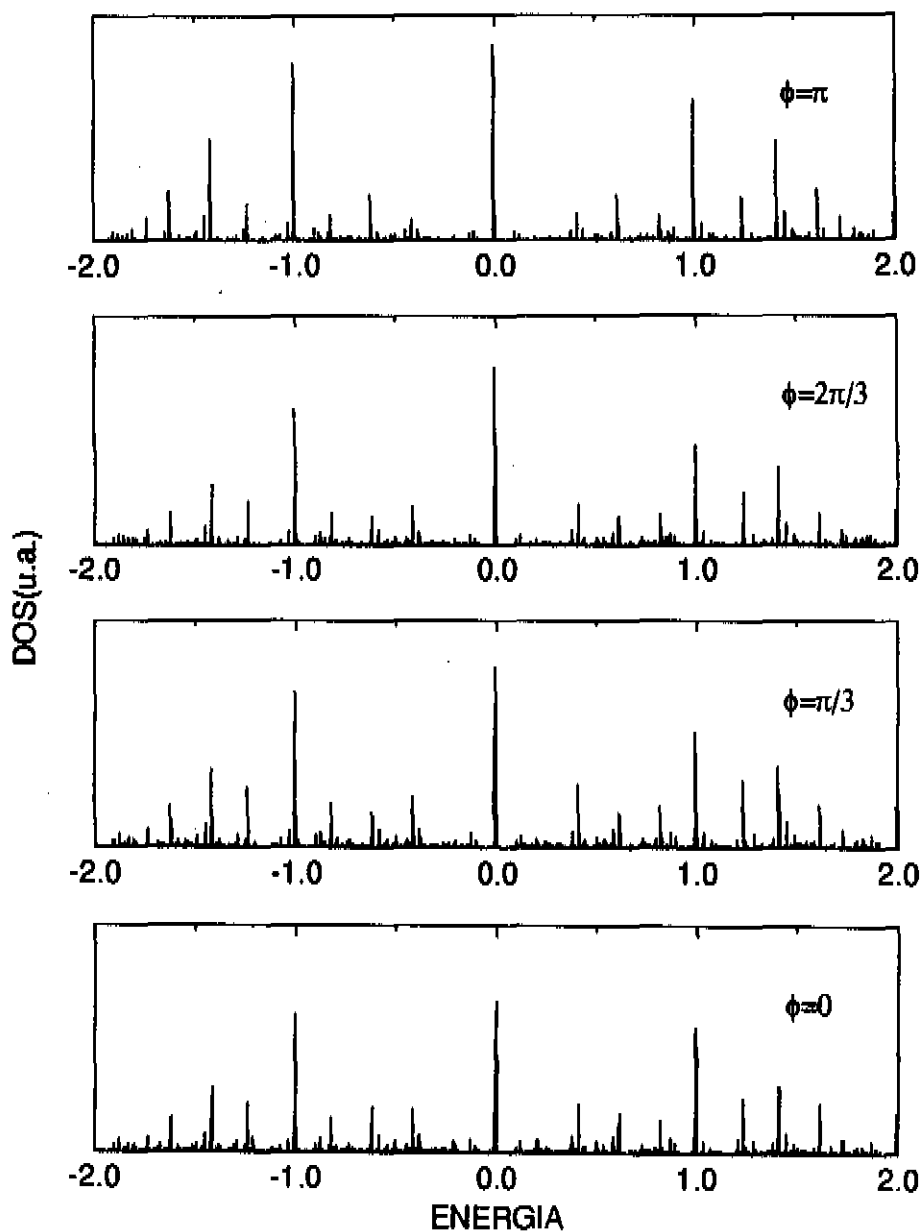


Fig. 3.25: DOS para rede cúbica - desordem aleatória, efeito do campo magnético, amostra com seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

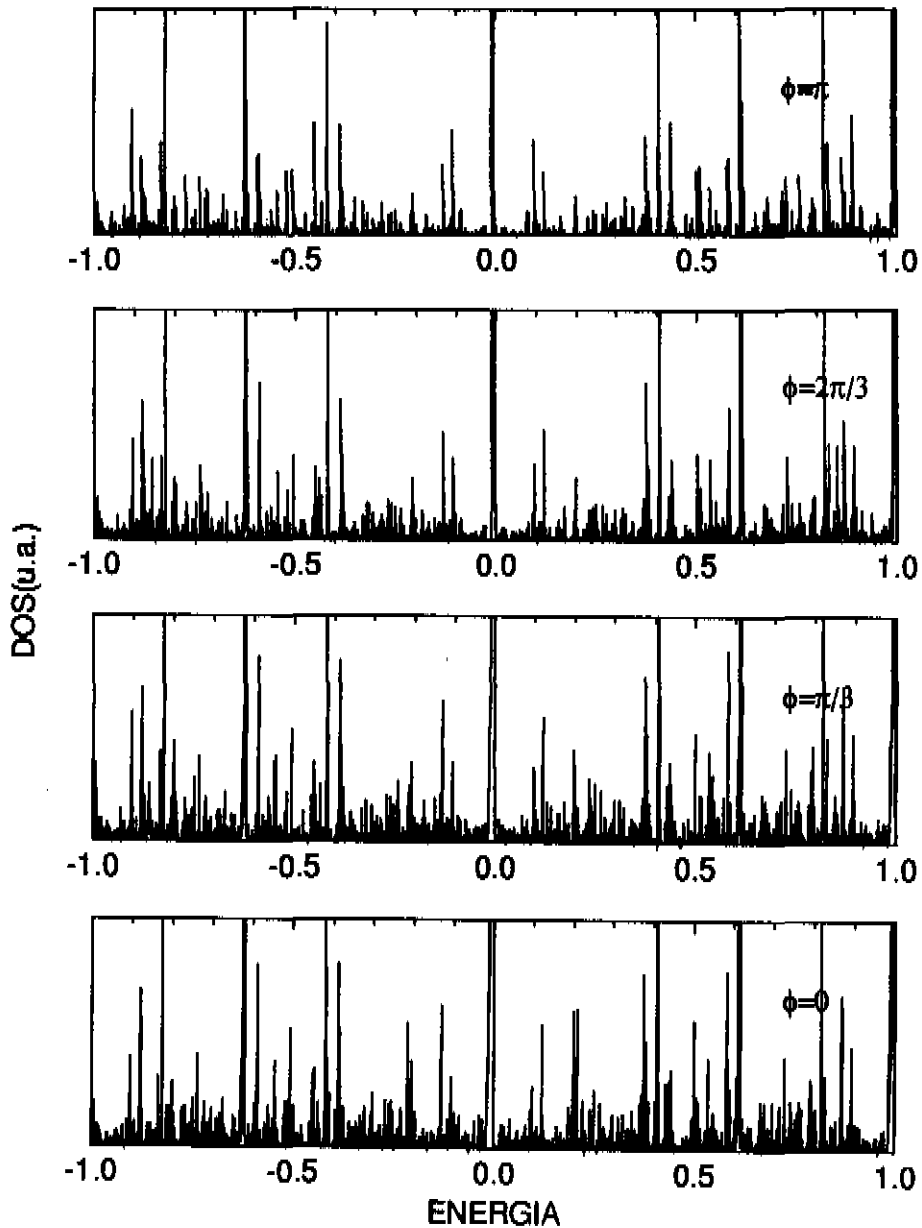


Fig. 3.26: DOS para rede cúbica - desordem aleatória, efeito do campo magnético  $N \times M = 12$ , intervalo de energia reduzido, altura reduzida pelo fator 10, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

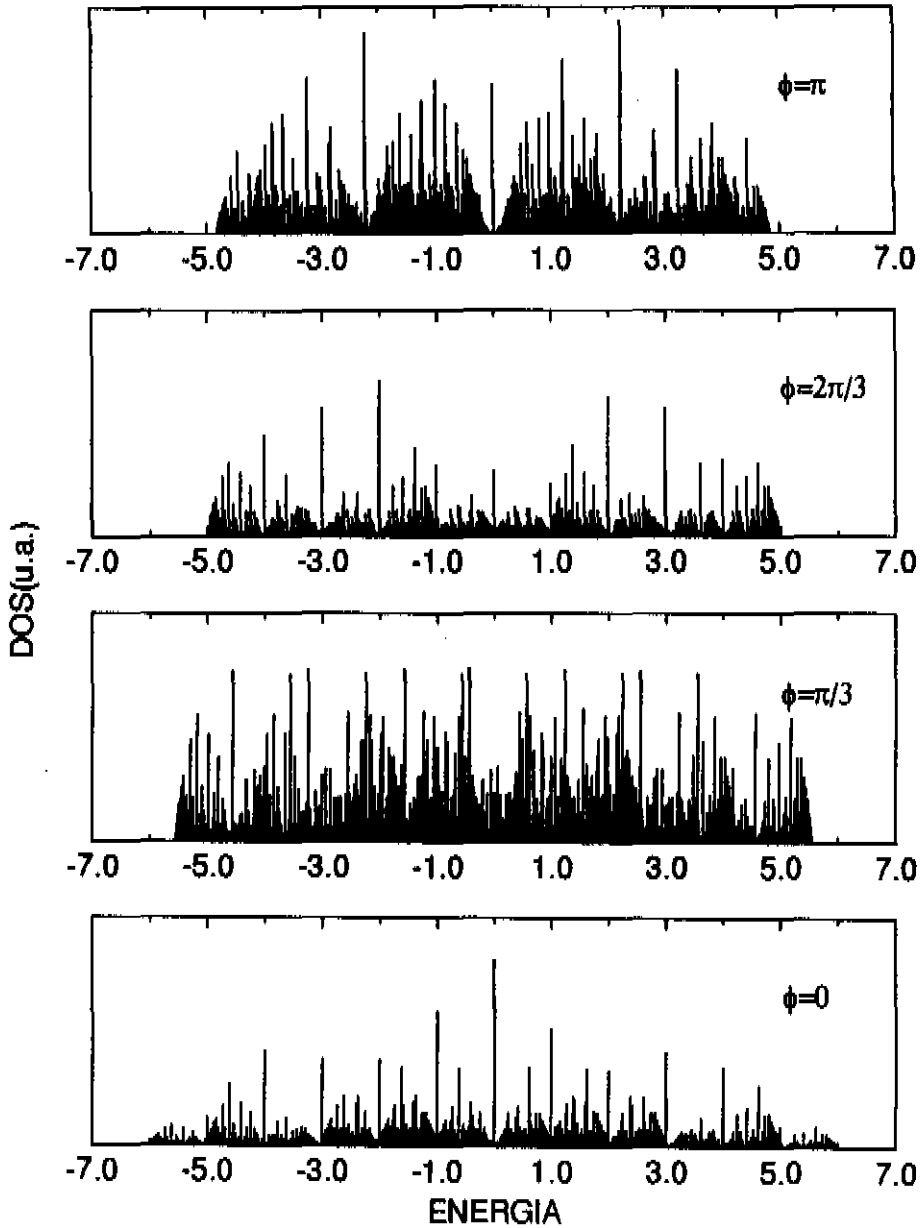


Fig. 3.27: DOS para rede cúbica - tendência à segregação, efeito do campo magnético, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$

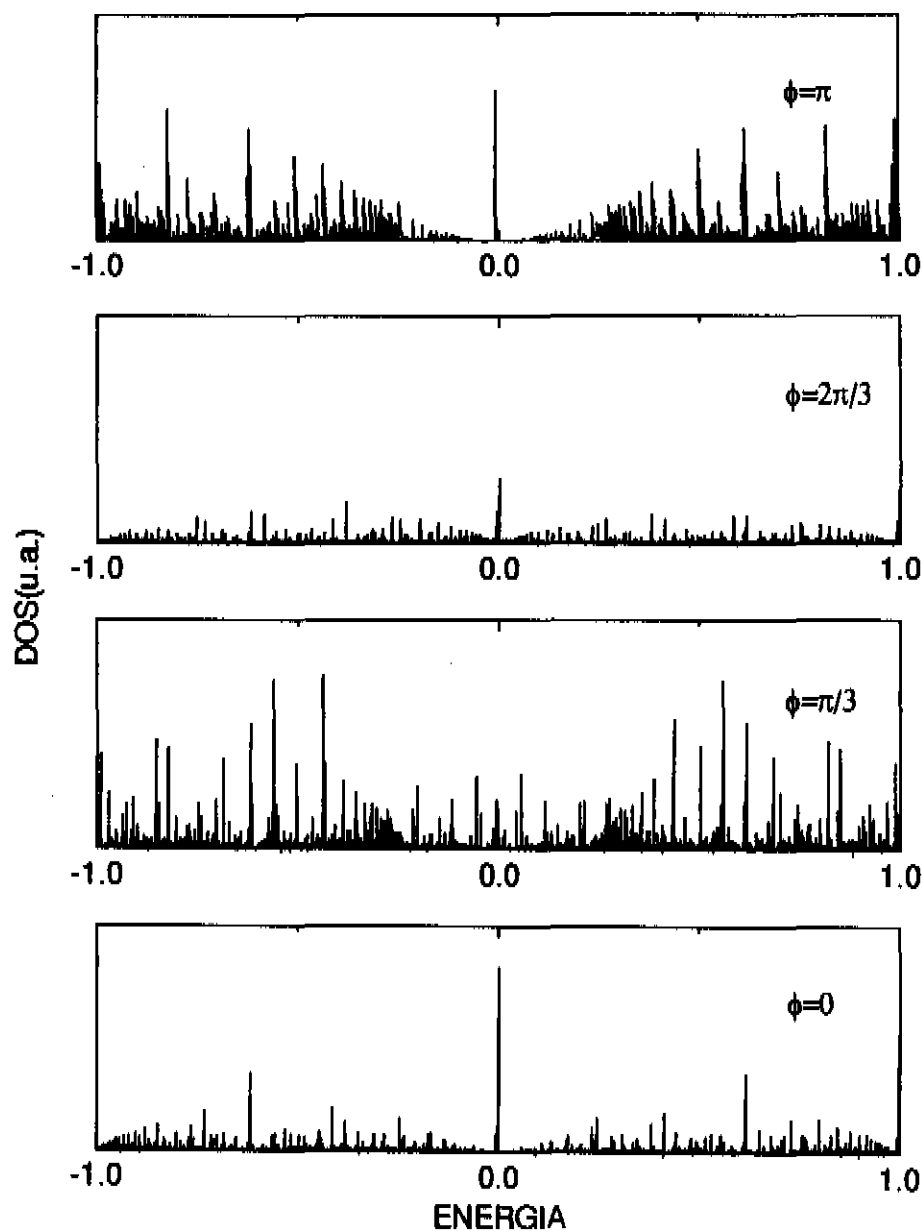


Fig. 3.28: DOS para rede cúbica - efeito do campo magnético tendência à segregação, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , intervalo de energia reduzido, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

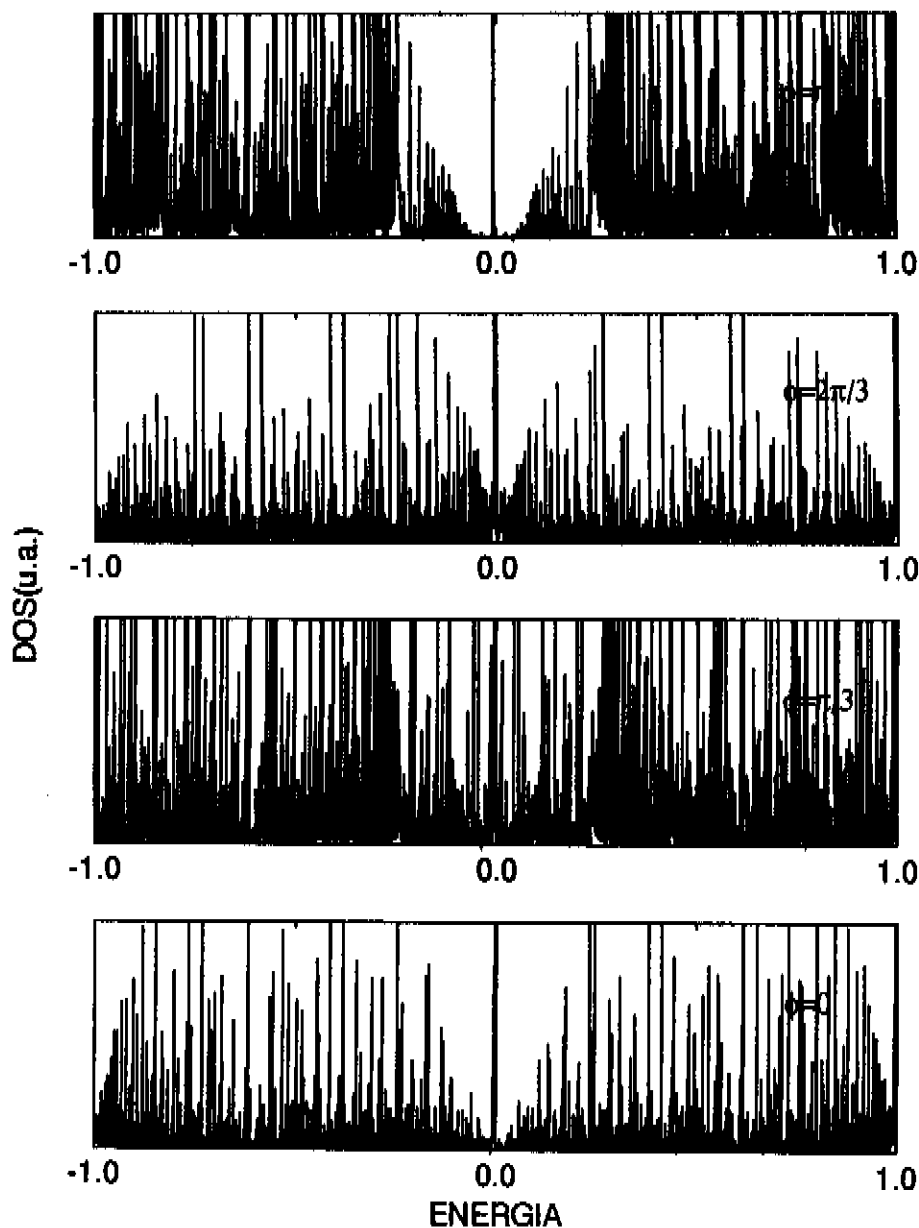


Fig. 3.29: DOS para rede cúbica - efeito do campo magnético, tendência à segregação, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , intervalo de energia reduzido, altura dos picos reduzida por fator 10, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

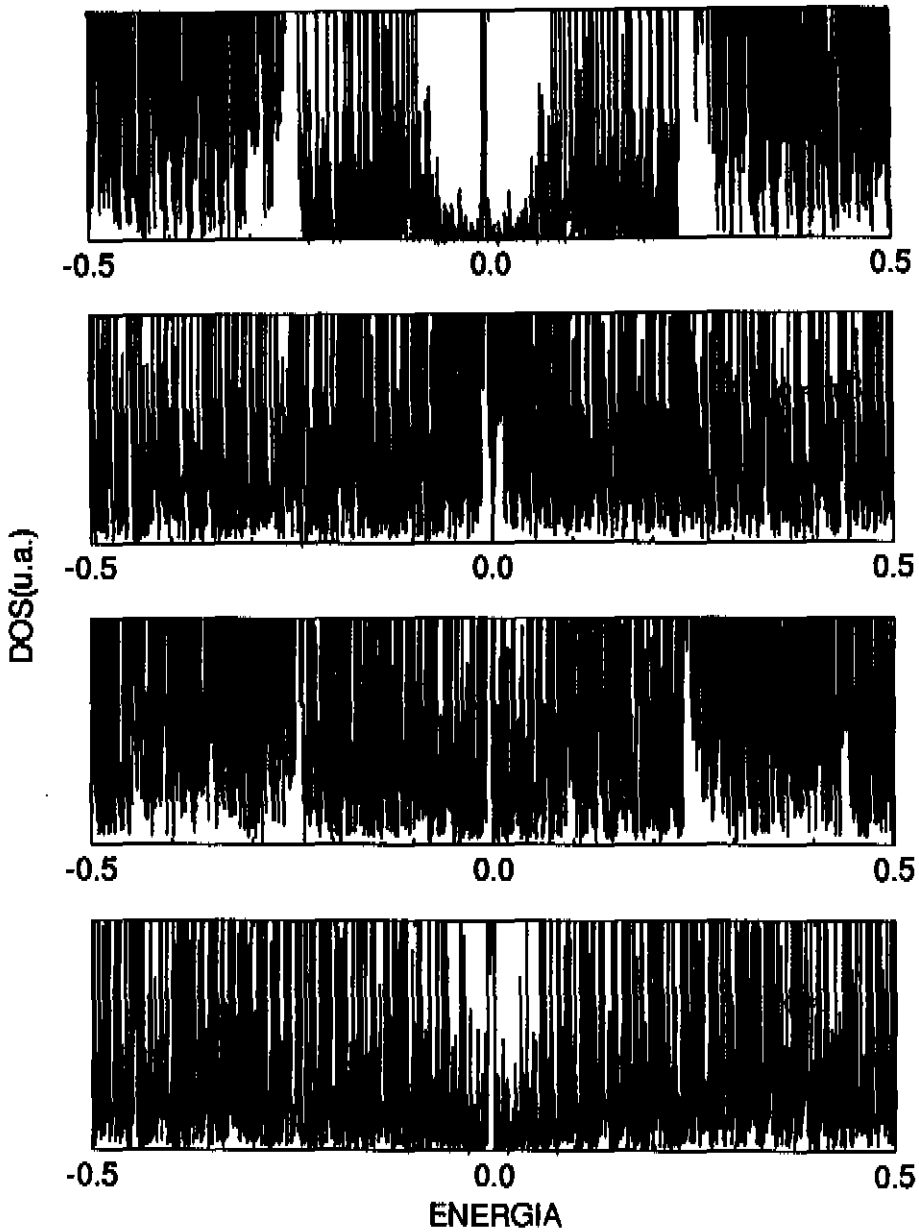


Fig. 3.30: DOS para rede cúbica - efeito do campo magnético, tendência à segregação, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , intervalo de energia reduzido, altura dos picos reduzida por fator 100, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

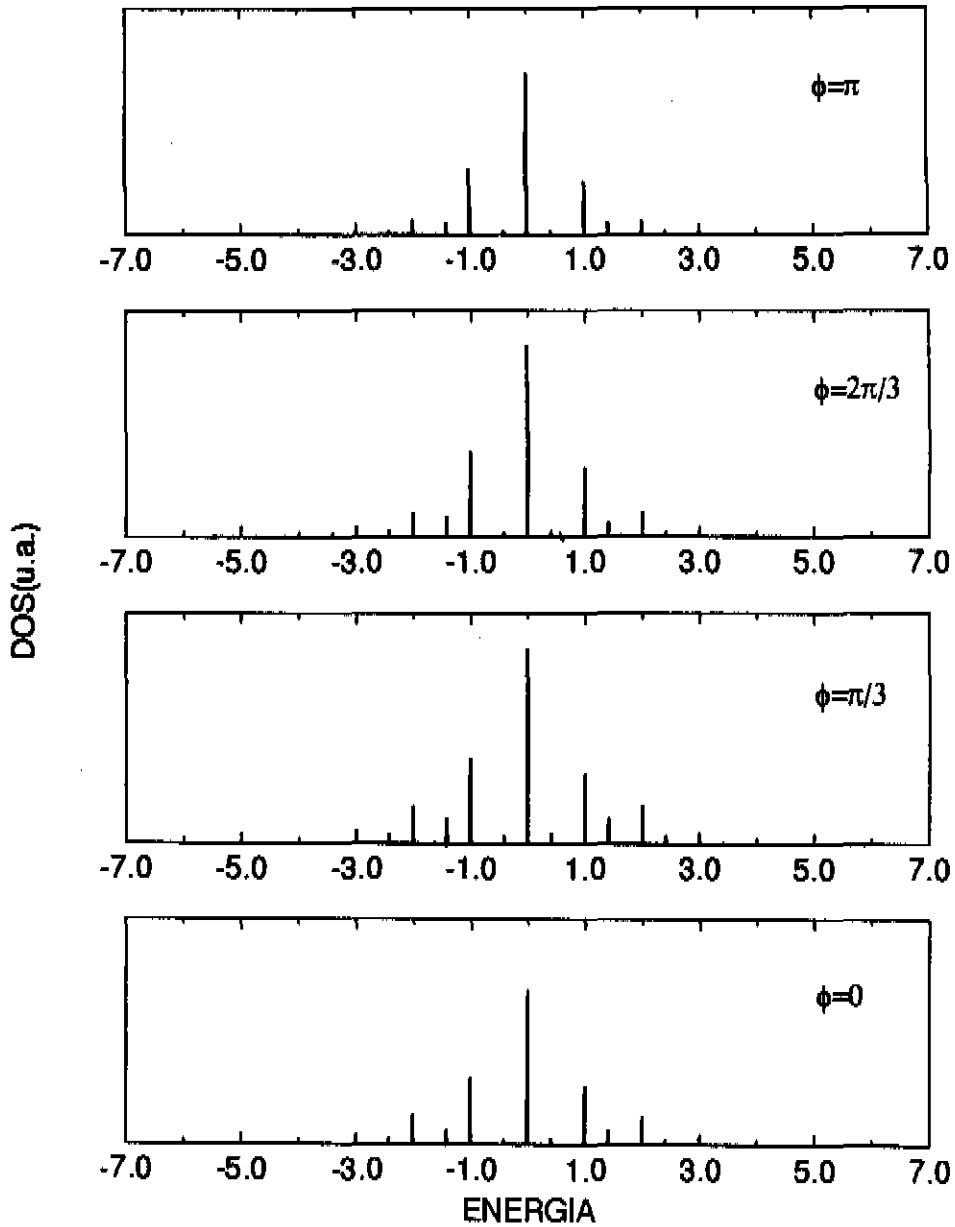


Fig. 3.31: DOS para rede cúbica - tendência à ordem, efeito do campo magnético, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .



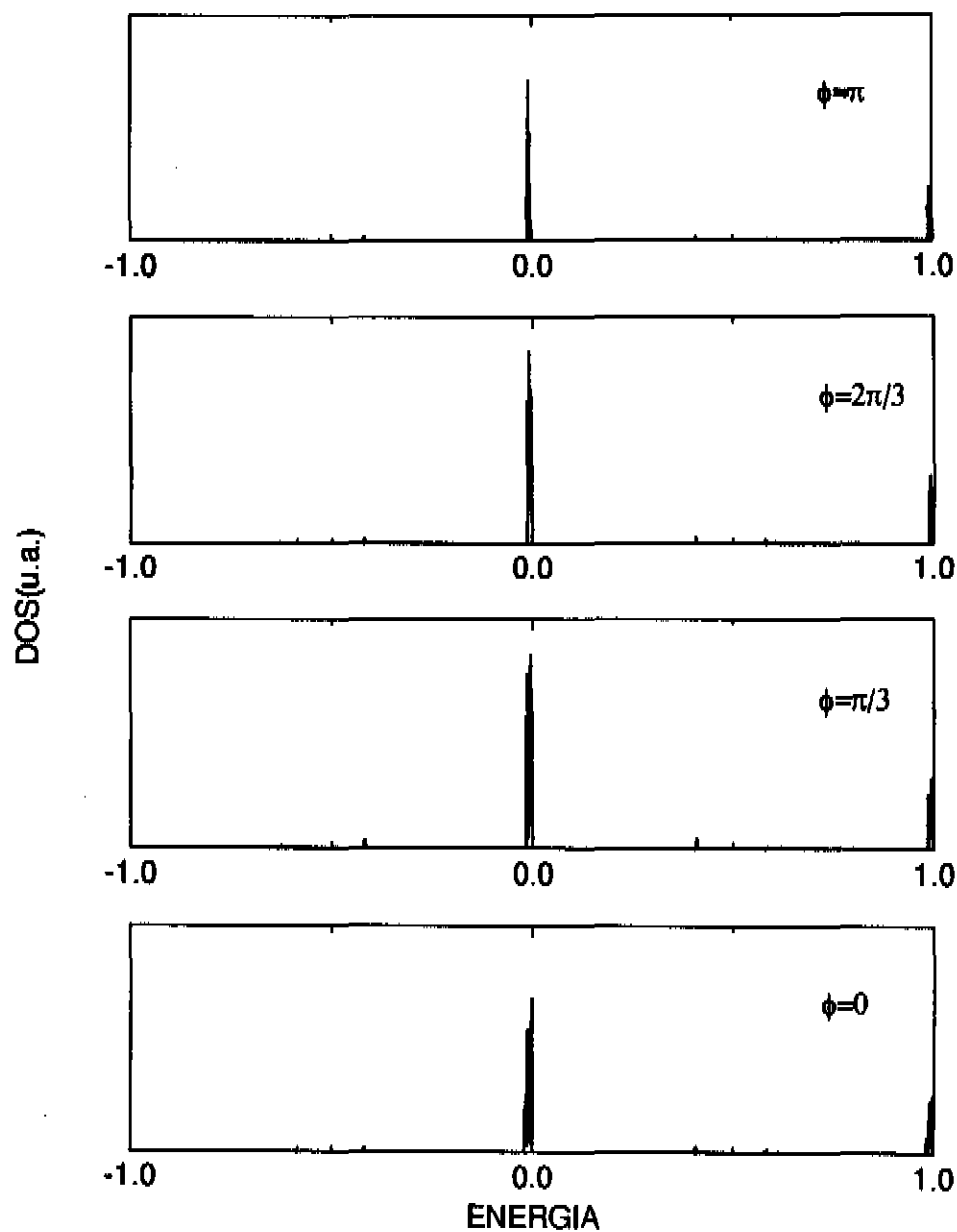


Fig. 3.32: DOS para rede cúbica - tendência à ordem, efeito do campo magnético, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , intervalo de energia reduzido, parte imaginária igual a  $5 \cdot 10^{-4}$ .

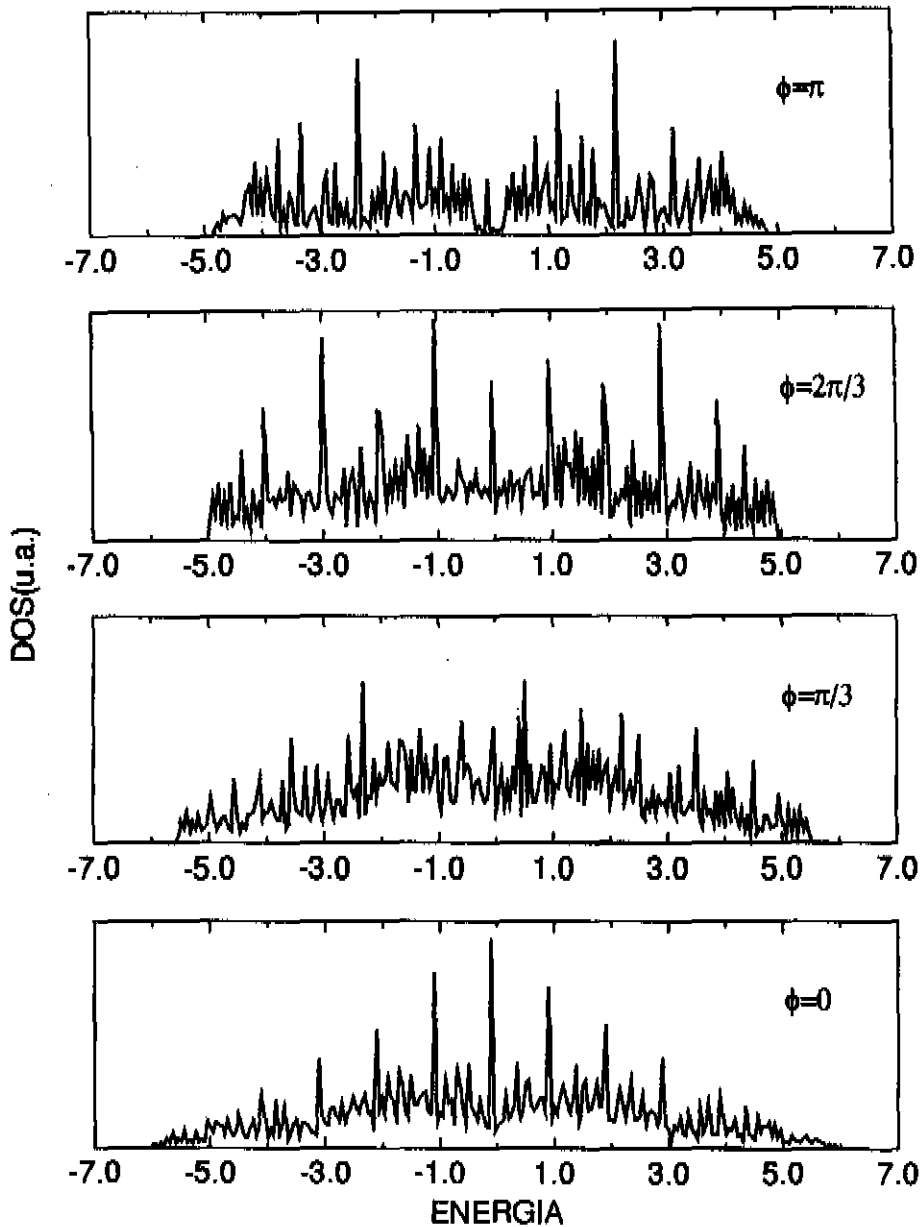


Fig. 3.33: DOS para rede cúbica -  $c_A = 0.8$ ,  $c_B = 0.2$  - desordem aleatória, efeito do campo magnético, seção transversal de dimensão  $N \times M = 12$ , parte imaginária igual a  $5.10^{-2}$ .

Com base na observação dos resultados ilustrados anteriormente, vemos que o efeito do campo magnético na localização dos estados eletrônicos, depende fortemente do efeito de ordem de curto alcance (SRO) além da concentração das espécies. Para concentrações iguais de ambas as espécies os estados eletrônicos são afetados significativamente próximo ao limite segregado. [7].

Em termos gerais, concluí que a questão de classificar o sistema como estando no regime de localização fraca ou forte, depende não apenas da concentração das espécies, mas do grau de correlação local que o sistema apresenta. Como ilustramos, podemos ter um sistema com concentrações iguais de ambas as espécies, e próximo do limite segregado, apresentando estados eletrônicos não exponencialmente localizados, o que caracterizaria o limite de localização fraca ou baixa desordem. Outro caso é o de uma amostra com  $c_A = 0.8$ ,  $c_B = 0.2$ , para desordem aleatória (figura 4.23) que apresenta também, características típicas de estados não exponencialmente localizados.

Neste contexto, onde as correlações de ordem de curto alcance aparecem como um parâmetro indispensável na caracterização dos estados eletrônicos, a questão de se determinar o “mobility edge”, ou seja a energia crítica que separa estados estendidos de estados localizados, deve ser feita não mais apenas em termos da variação das concentrações das espécies. Nos exemplos que ilustramos, não fizemos nenhum estudo do “mobility edge”, visto que estamos no limite de percolação quântica, onde temos a formação de 2 subbandas separadas em energia. O que se espera é que no limite em que as duas bandas se sobreponham, a inclusão de efeitos de SRO influencie os

Com base na observação dos resultados ilustrados anteriormente, vemos que o efeito do campo magnético na localização dos estados eletrônicos, depende fortemente do efeito de ordem de curto alcance (SRO) além da concentração das espécies. Para concentrações iguais de ambas as espécies os estados eletrônicos são afetados significativamente próximo ao limite segregado. [7].

Em termos gerais, concluí que a questão de classificar o sistema como estando no regime de localização fraca ou forte, depende não apenas da concentração das espécies, mas do grau de correlação local que o sistema apresenta. Como ilustramos, podemos ter um sistema com concentrações iguais de ambas as espécies, e próximo do limite segregado, apresentando estados eletrônicos não exponencialmente localizados, o que caracterizaria o limite de localização fraca ou baixa desordem. Outro caso é o de uma amostra com  $c_A = 0.8$ ,  $c_B = 0.2$ , para desordem aleatória (figura 4.23) que apresenta também, características típicas de estados não exponencialmente localizados.

Neste contexto, onde as correlações de ordem de curto alcance aparecem como um parâmetro indispensável na caracterização dos estados eletrônicos, a questão de se determinar o “mobility edge”, ou seja a energia crítica que separa estados estendidos de estados localizados, deve ser feita não mais apenas em termos da variação das concentrações das espécies. Nos exemplos que ilustramos, não fizemos nenhum estudo do “mobility edge”, visto que estamos no limite de percolação quântica, onde temos a formação de 2 subbandas separadas em energia. O que se espera é que no limite em que as duas bandas se sobreponham, a inclusão de efeitos de SRO influencie os

“mobility edges”, e que estes não dependam apenas da concentração das espécies.

# Conclusões

Dentro dos métodos existentes para investigar a localização dos estados eletrônicos em função da desordem, o método por nós desenvolvido para calcular a DOS se apresenta extremamente vantajoso, pois:

- Fornece uma estrutura detalhada e realística da DOS, o que permite inferirmos sobre a localização dos estados eletrônicos. (Outros métodos para calcular a DOS dão em geral um estrutura muito pobre.)
- Efeitos de Ordem de Curto Alcance (SRO) e de campo magnético são incluídos no cálculo de maneira direta.
- Os resultados obtidos nos levam à indicação de que para 2 dimensões uma transição de estados localizados para estados estendidos pode ocorrer em função de SRO. Quando o sistema aproxima-se do limite segregado (para concentrações iguais das espécies) há uma tendência à deslocalização dos estados eletrônicos. Esse é um resultado bastante interessante, visto que resultados da literatura em geral não levam em consideração na análise da localização efeitos de SRO [6].

- Para sistemas quase unidimensionais com a geometria de barras, o efeito da presença de campo magnético na localização dos estados eletrônicos mostra forte dependência com os efeitos da ordem de curto alcance. Variando-se o parâmetro de correlação e a concentração, podemos ver que a estrutura da DOS é bastante sensível à presença do campo no limite de desordem fraca, ou seja quando os estados eletrônicos não são exponencialmente localizados.

Nossos resultados apontam para a importância do efeito de ordem de curto alcance na localização dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. Obtivemos indicações de que os limites de desordem fraca e forte (ou localização fraca e forte) são função não apenas da concentração, mas também do grau de correlação local.

## Appendix A

# Método NFC (“Negative Factor Counting”)

O Método NFC se constitui em um dos métodos numéricos mais amplamente usados para determinação dos autovalores de um conjunto de equações lineares. Proposto por Dean e Martin [14] como um teorema (Teorema do Autovalor Negativo) válido em geral para matrizes reais simétricas, tem sido amplamente usado para a obtenção da DOS de cadeias lineares. Em 1 dimensão não há necessidade de memória de armazenamento, assim cadeias muito longas podem ser tratadas (mais que  $10^6$  átomos), o que faz com que esses resultados sejam considerados exatos. Em duas e 3 dimensões tem-se problema no entanto com o armazenamento de dados, e a solução fica limitada pelo tamanho do sistema que pode ser considerado [9]

Seja uma matriz  $M$  de dimensões  $N \times N$ . Queremos encontrar o número de autovalores  $\alpha$  menores que  $\lambda$ :  $G(\lambda)$ . Os autovalores são as raízes da equação:

$$\det(M - \alpha) = \det L = 0 \quad (\text{A.1})$$

onde:

$$M\chi_\alpha = \alpha\chi_\alpha \quad (\text{A.2})$$



Em termos da densidade espectral  $g(\lambda)$ , temos:

$$G(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} g(\alpha) d\alpha \quad (\text{A.3})$$

Fracionando a matriz  $L$  em:

$$L^{(N)} = \begin{bmatrix} L^{(n)} & Y \\ Y^T & Z^{(m)} \end{bmatrix}$$

onde  $L^{(n)}$  é de ordem  $n \times n$  e  $Z^{(m)}$  é de ordem  $m \times m$ , com  $m + n = N$ . Assim:

$$\det L^{(N)} = \det L^{(n)} \cdot \det L^{(m)}, \quad (\text{A.4})$$

onde:

$$L^{(m)} = Z^{(m)} - Y^T([L^{(n)}]^{-1})Y \quad (\text{A.5})$$

Tomando  $n = 1$ :

$$\det L^{(N)} = \prod_{m=1}^N l_{11}^{(m)}(\alpha) \quad (\text{A.6})$$

onde  $l_{11}^{(m)}$  é o elemento (1,1) de  $L^{(m)}$ , sendo que  $l_{11}^{(m)}$  deve mudar de sinal para cada autovalor. Desta maneira  $g(\lambda)$  é o número de  $l_{11}^{(m)}(\alpha)$ 's negativos.

# Bibliografia

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, e T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [3] N. Mott, *J. Non-Cryst. Solids* **1**, 1 (1968).
- [4] G. Theodorou e M. H. Cohen, *Phys. Rev. B* **13**, 4597 (1976).
- [5] S. Sil, S. M. Karmakar e R. K. Moitra, *Phys. Lett. A* **4**, 344 (1993).
- [6] D. F. de Mello, e G. G. Cabrera, *Solid State Commun.* **94**, 703 (1995).
- [7] D. F. de Mello e G. G. Cabrera, a ser publicado.
- [8] R. J. Elliott, J. A. Krumhansl e P. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).
- [9] W. M. Vischer e J. E. Gubernatis in *Computer Experiments in Disordered Solids*, Dynamical Properties of Solids, vol. 4, edited by G. K. Horton e A. A. Maradudin, (North-Holland 1980).
- [10] P. A. Lee e T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).

- [11] B. Kramer, e A. Mackinnon, *Rep. Prog. Phys.*, **56**, 12 (1993).
- [12] G. Bergman, *Phys. Rep.* **107**, 1 (1984).
- [13] Bodo Huckestein, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 357 (1995).
- [14] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
- [15] A. MacKinnon e B. Kramer, *Z. Phys. B* **53**, 1 (1983).
- [16] J. P. G. Taylor e A. MacKinnon, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 9963 (1989).
- [17] A. Mackinnon, *Z. Phys. B: Condensed Matter* **59**, 385 (1985).
- [18] C. M. Soukoulis, E. N. Economou e Gary S. Grest, *Phys. Rev. B* **36**, 8649 (1987).
- [19] C. M. Soukoulis, Qiming Li e Gary S. Grest, *Phys. Rev. B* **45**, 7724 (1992).
- [20] C. M. Soukoulis e G. S. Grest, *Phys. Rev B* **44**, 4685 (1991).
- [21] Th. Koslowski e W. von Niessen, *Phys. Rev. B* **42**, 10342 (1990).
- [22] Y. Meir, A. Aharony e A. Brooks Harris, *Europhys. Lett.* **10**, 275 (1989).
- [23] J. M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge University Press (Cambridge, 1979).
- [24] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Rev. ed., Addison-Wesley, (Massachusetts 1994).
- [25] B. Kramer, G. Bergman e Y. Bruynseraede, *Localization, Interaction and Transport Phenomena*, Springer-Verlag Vol. 61, 1984.

- [26] T. Matsubara, *The Structure and Properties of Matter*, v. 28, Springer-Verlag, (Berlin 1982).
- [27] Y. Nagaoka e H. Fukuyama, *Anderson Localization*, Springer-Verlag vol. 39, 1982.
- [28] F. Ducastelle in *Order and Phase Stability in Alloys*, Cohesion e Structure, vol. 3, edited by D.G. Pettifor e A.H. Cottrell, North-Holland, (Amsterdam 1991).
- [29] R. Haydock, V. Heine e M. J. Kelly, *Solid State Physics* **35**, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz e D. Turnbull, Academic Press (New York 1980).
- [30] O.K. Andersen e O. Jepsen, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2571 (1984).
- [31] J. Kudrnovsky, V. Drehal, e J. Masek, *Phys. Rev.* **B35**, 2487 (1987).
- [32] D. J. Thouless, *Phys. Reports* **C13**, 93 (1974).
- [33] T. Saha, I. Dasgupta e A. Mookerjee, *J. Phys.: Cond. Matter* **6**, 1245 (1994).
- [34] R. Kikuchi, *Phys. Rev.* **81**, 988 (1951).
- [35] S. Weinketz, B. Laks, e G G Cabrera, *Phys. Rev. B*, **43**, 6474 (1991).
- [36] R. Kikuchi e Stephen G. Brush, *J. Chem. Phys*, **47**, 195 (1967).
- [37] J. L. Pichard e G. Sarma, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14**, L127 (1981).
- [38] C.E.T. Gonçalves da Silva e B. Koiller, *Solid State Commun.* **40**, 215 (1981).
- [39] Michael N. Barber e Michael E. Fisher, *Ann. Phys.* **77**, 1 (1973).

- [40] Michael N. Barber in *Finite Size Scaling*, Phase Transitions, v. 8, edited by C. Domb e J. L. Leibowitz, Academic Press, (London 1983).
- [41] G. G. Cabrera, R. Jullien, E. Brézin e J. Zinn-Justin, *J. Physique* **47**, 1305 (1986).
- [42] A. Kawabata, *Solid State Commun.* **34**, 431 (1980).
- [43] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, edited by M. Cardona, P. Fulde e H. J. Queisser, Springer-Verlag (Berlin, 1979).
- [44] F. J. Wegner, *Phys. Rev. B* **7**, 83 (1979).
- [45] N. F. Mott e E. A. Davies, *Electronic Processes in Non-Crystallines Materials*, 2nd edn., (Oxford Clarendon, 1979).
- [46] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, and P.A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1288 (1980).
- [47] H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Japan* **50**, 3407 (1981).
- [48] M. J. Uren, R. A. Davies, e M. Pepper, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13**, L985 (1980).
- [49] Shih-Ying Hsu e J. M. Valles Jr., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2331 (1995).
- [50] G. Bergman, *Phys. Rev.* **25**, 2937 (1982).
- [51] S. Hikami, A. I. Larkin, e Y. Nagaoka, *Prog. Theor. Phys.* **63**, 707 (1980).
- [52] D. Yu Sharvin e Yu V. Sharvin, *JETP Lett.* **34**, 272 (1981).

- [53] B. L. Altshuler e A. G. Aronov, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1288 (1980).
- [54] J. P. Spriet, G. Biskupski e H. Dubois, *Phil. Mag. B* **54**, L95 (1986).
- [55] U. Sivan, O. Entin-Wohlman e Y. Imry, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1566 (1988).
- [56] Y. Meir, N. S. Wingreen, O. Entin-Wohlman, and B. L. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1517 (1991).
- [57] H. W. Jiang, C. E. Johnson, e K. L. Wang, *Phys. Rev. B* **46**, 12830 (1992).
- [58] M. E. Raikh, J. Czingon, Qiu-yi Ye, F. Koch, W. Schoepe, and K. Ploog, *Phys. Rev. B* **45**, 6015 (1992).
- [59] M. E. Raikh, *Solid State Commun.* **75**,935, (1990).
- [60] M. Bockstedte e S. F. Fisher, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 6043 (1993).
- [61] G. Biskupski e A. Briggs, *Non-Cryst. Solids* **97 98**, 683 (1987).
- [62] T. Wang, K. P. Clark, G. F. Spencer, A. M. Mack e W. P. Kirk, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 709 (1994).
- [63] A. L. Efros e B. I. Shklovskii, in *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, edited by A. L. Efros e M. Pollak, North-Holland, (Amsterdam 1985), p.409.
- [64] B. I. Shklovskii e A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer-Verlag Series in Solid State Science, v. 45, (Berlin 1984).

- [65] D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor&Francis, (London, 1985).
- [66] S. Kirkpatrick, e T. P. Eggarter, *Phys. Rev. B***6**, 3598 (1972).
- [67] J. Hubbard, *Phys. Rev. B***19**, 1828 (1979).
- [68] R. P. Feynman, *Lectures on Physics*, vol. 3 (New York: Addison-Wesley).
- [69] R. Peierls, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933).