

# Introdução à física de sistemas desordenados em matéria condensada

Aluno: Jadyr Henrique Fonte Boa Nunes Pereira

Orientador: José Abel Hoyos Neto

Instituto de Física de São Carlos — Universidade de São Paulo

31 de outubro de 2024

TCC

## Parte I

# Resumo do projeto e objetivos

Este projeto tem como objetivo o estudo de efeitos de inhomogeneidades em sistemas de matéria condensada. Primeiramente foi estudado o fenômeno de localização de Anderson em um sistema unidimensional, no modelo contínuo de Kronig-Penney. Depois foi refeito o mesmo estudo no modelo tight-binding de Aubry-André, concluindo que a localização ocorre nos dois casos. De forma que no modelo de Kronig-Penney os estados estão sempre localizados, enquanto no Aubry-André ocorre uma transição de fase entre auto-estados estendidos e localizados.

## Parte II

# Materiais e métodos

Para estudar localização de Anderson, utilizaremos o modelo de Kronig-Penney (uma partícula num potencial do tipo barreiras retangulares) em uma dimensão espacial com o intuito de verificar como as bandas e gaps de energia são modificadas na presença das inhomogeneidades. Aqui, faz-se necessário o uso de métodos computacionais para diagonalizar exatamente o modelo e calcular quantidades-chaves como transmitância, e comprimento de localização. Para estudar transições de fase, utilizaremos o modelo de Aubry-André, para estudar a transição metal—isolante de Anderson, analisado por métodos análogos ao modelo de Kronig-Penney.

## Parte III

# Resultados

## 1 Barreiras ordenadas, bandas e *gaps* de energia

O modelo de Kronig-Penney é uma forma simples de descrever a estrutura de sólidos cristalinos através da Mecânica Quântica. Nomeado em homenagem à Ralph Kronig e William Penney, o modelo consiste em um potencial composto por barreiras retangulares (normalmente regulares e periódicas) que representam a estrutura do cristal ou metal e um elétron livre descrito pela auto-função do Hamiltoniano. Com esse modelo simples é possível descrever diversas propriedades de alguns sólidos como, por exemplo, sua condutividade.

## 1.1 Teorema de Bloch

Uma simetria muito importante principalmente em física do estado sólido é a simetria de translação, que tem como consequência o Teorema de Bloch [5].

Considerando um potencial periódico tal que  $V(x \pm a) = V(x)$ , como por exemplo uma rede cristalina de barreiras com um elétron se movimentando no fio. Sendo  $\tau(l) = e^{ipl/\hbar}$  o operador translação por  $l$  ( $p$  sendo o operador momento) e  $x$  o operador posição, de forma que

$$\tau^\dagger(l)x\tau(l) = x + l \implies \tau(l)|x'\rangle = |x' + l\rangle.$$

Como o potencial é periódico com período  $a$ , então  $\tau^\dagger(a)V(x)\tau(a) = V(x + a) = V(x)$ .

Analogamente para o Hamiltoniano  $H = \frac{1}{2m}p^2 + V(x)$ , já que a parte cinética também é invariante por translações

$$\tau^\dagger(a)H\tau(a) = H \iff [H, \tau(a)] = 0,$$

ou seja, possuem a mesma base de auto-estados com diferentes autovalores.

Sendo  $|n\rangle$  um estado de uma partícula confinada no  $n$ -ésimo vale do potencial periódico externo e  $H|n\rangle = E_0|n\rangle$ , com  $E_0$  a energia fundamental do sistema. O operador translação claramente atua no estado  $|n\rangle$ ,  $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ , indicando que  $|n\rangle$  não é auto-estado do sistema. Para encontrar os auto-estados comuns a  $H$  e  $\tau(a)$ , pode ser feita uma combinação linear  $|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle$ , que é auto-estado do operador de translação e do Hamiltoniano:

$$\tau(a)|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+1\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta}|n\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle.$$

Além disso, notamos que  $\langle x|\tau(a)|\theta\rangle = \langle x-a|\theta\rangle = e^{-i\theta}\langle x|\theta\rangle$ . Finalmente, sendo a função de onda  $\theta(x) = \langle x|\theta\rangle$  e definindo  $k \equiv \theta/a$ , temos que

$$\theta(x) \equiv \psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x), \quad (1)$$

com  $u_k(x) = u_k(x+a)$ . Ou seja, a função de onda é uma onda plana multiplicada por uma função cujo período é o mesmo do potencial externo  $V(x)$ . Esse é o teorema de Bloch para o caso unidimensional.

## 1.2 Operador de Espalhamento

Tratando de certos sistemas de espalhamento em Mecânica Quântica, em que partículas livres de forma geral incidem e são refletidas por algum processo, é possível criar um operador que relaciona as amplitudes das partículas livres incidentes e as que saem. Em uma dimensão pode ser representada como dois canais de entrada (A e D) e dois de saída (B e C) como no esquema da Fig. 1.

Sendo a região à esquerda a primeira e à direita a segunda, tem-se partículas livres da forma

$$\begin{cases} \phi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \phi_2(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \end{cases},$$

com  $\hbar k = \sqrt{2mE}$ . Supondo então uma relação entre as amplitudes de entrada e de saída dada por um operador de espalhamento ou matriz  $S$  é dado por  $\psi_{\text{out}} \equiv S\psi_{\text{in}}$ , com  $\psi_{\text{out}} \equiv \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix}$  e  $\psi_{\text{in}} \equiv \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$ .

Pela conservação de corrente de probabilidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \text{ com } \rho = \psi^* \psi \text{ e } \vec{J} = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right),$$

conclui-se que, para um auto-estado,  $J_1(x) = J_2(x) = \text{cte}$  porque  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ . Em suma, a corrente de probabilidade é preservada. Isso implica que a matriz  $S$  de espalhamento é unitária. Calculando as correntes e aplicando sua conservação, resulta em

$$|A|^2 + |D|^2 = |B|^2 + |C|^2.$$

Se fizermos  $D = 0$ ,  $B = R$  e  $C = T$ , recupera-se uma relação bem intuitiva sobre a conservação das correntes transmitidas e refletidas

$$|A|^2 = |T|^2 + |R|^2.$$

Definindo a transmitância  $\mathcal{T} \equiv \frac{|T|^2}{|A|^2}$  e refletância  $\mathcal{R} \equiv \frac{|R|^2}{|A|^2}$ , temos que

$$\mathcal{T} + \mathcal{R} = 1. \quad (2)$$

Sendo  $\psi_{\text{out}}^\dagger \psi_{\text{out}} = |B|^2 + |C|^2 = |A|^2 + |D|^2 = \psi_{\text{in}}^\dagger \psi_{\text{in}}$  e  $\psi_{\text{out}} = S\psi_{\text{in}} \implies \psi_{\text{out}}^\dagger = \psi_{\text{in}}^\dagger S^\dagger$ . Além disso,  $\psi_{\text{in}}^\dagger S^\dagger S \psi_{\text{in}} = \psi_{\text{out}}^\dagger \psi_{\text{out}} = \psi_{\text{in}}^\dagger \psi_{\text{in}}$ , o que implica em  $S^\dagger S = 1 \implies S^\dagger = S^{-1}$ . Ou seja, a matriz  $S$  é unitária.

Aplicando a Simetria de Reversão Temporal ao sistema, temos que  $\phi^*(x)$  também é solução da equação de Schrödinger. Ou seja,  $\phi_1^* = A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}$  e  $\phi_2^* = C^* e^{-ikx} + D^* e^{ikx}$ , também são soluções (vide Fig. 2).

Dessa forma,  $\begin{pmatrix} A^* \\ D^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} B^* \\ C^* \end{pmatrix} \implies \psi_{\text{in}}^* = S\psi_{\text{out}}^*, \implies \psi_{\text{in}} = S^* \psi_{\text{out}} = S^* S \psi_{\text{in}}, S^* S = 1 \implies S^{-1} = S^*$ . Como a matriz é unitária,  $S^\dagger = S^{-1}$ , então  $(S^*)^T = S^*$ . Ou seja,  $S^T = S$ , i.e., a matriz  $S$  também é simétrica. Finalmente,

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_0 \\ S_0 & S_{22} \end{pmatrix}.$$

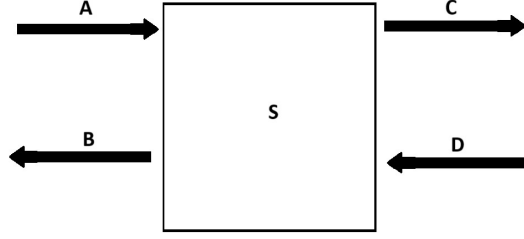


Figura 1: Esquema simples do Operador de Espalhamento.

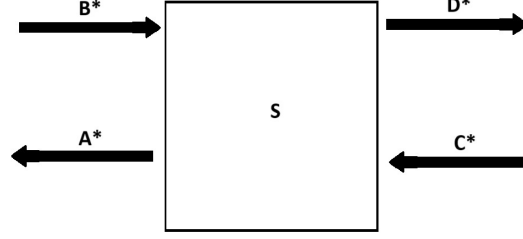


Figura 2: Esquema simples do Operador de Espalhamento revertido temporalmente em relação à Fig. 1.

Além disso, porque  $SS^\dagger = 1$ , e  $S^* = S^{-1}$ , temos respectivamente que

$$\begin{pmatrix} |S_{11}|^2 + |S_0|^2 & S_0^* S_{11} + S_0 S_{22}^* \\ S_0 S_{11}^* + S_0^* S_{22} & |S_{22}|^2 + |S_0|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} S_{11}^* & S_0^* \\ S_0^* & S_{22}^* \end{pmatrix} = (\det S)^{-1} \begin{pmatrix} S_{22} & -S_0 \\ -S_0 & S_{11} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

### 1.3 Matriz de Transferência

Outro operador muito importante é a matriz de transferência  $M$ , diretamente relacionada com a matriz de espalhamento. Esse operador é interessante pois pode ser utilizado para encadear várias barreiras como será explicitado mais adiante.

A matriz  $M$  é definida por  $\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \equiv M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ , e pode ser calculada a partir da matriz  $S$ .

Sendo  $\begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix}$ , e resolvendo para  $C$  e  $D$  e usando as propriedades (3), conclui-se que

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{S_0} & -\frac{S_{11}}{S_0} \\ \frac{S_{22}}{S_0} & -\frac{\det S}{S_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{S_0} & -\frac{S_{11}}{S_0} \\ \frac{S_{22}}{S_0} & \frac{1}{S_0^*} \end{pmatrix},$$

e que  $\det(M) = 1$ . A transformação inversa também pode ser alcançada

$$S = \begin{pmatrix} -\frac{M_{12}}{M_{11}} & \frac{1}{M_{11}} \\ \frac{1}{M_{11}} & \frac{M_{21}}{M_{11}} \end{pmatrix}.$$

Com isso temos as propriedades gerais dos operadores de Espalhamento e Transferência para uma dimensão, que serão utilizados posteriormente.

### 1.4 Potencial de Barreiras Uniformes em condições periódicas de contorno

Nesta seção será aplicado o teorema de Bloch (vide Sec. 1.1) para um potencial de barreiras uniformes em uma geometria de anel. O intuito é demonstrar a existência de bandas e *gaps* de energia no espectro.

Precisamente, o potencial é dado por

$$V(x) = \begin{cases} W, & -a < x < 0, \\ 0, & 0 < x < b, \end{cases}$$

sendo  $V$  com período  $a + b$ . Definindo  $\gamma = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(W - E)}$  e  $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ , a solução da equação de Schrödinger na região  $-a < x < b$  é

$$\phi(x) = \begin{cases} Ce^{\gamma x} + De^{-\gamma x} & -a < x < 0, \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & 0 < x < b. \end{cases}$$

Pela continuidade da função de onda e sua derivada,  $\phi_+(0) = \phi_-(0)$  e  $\phi'_+(0) = \phi'_-(0)$ , tem-se que  $A + B = C + D$  e  $ik(A - B) = \gamma(C - D)$ .

Pelo Teorema de Bloch (1), a função de onda pode ser expressa como  $\phi_\omega(x) = u(x)e^{i\omega x}$ . Impondo condições periódicas de contorno para a função de onda,  $\phi_\omega(x) = \phi_\omega(x + N(a + b))$ , com  $N$  sendo o número total de barreiras, temos a quantização de  $\omega \equiv \omega_n = \frac{2\pi n}{N(a + b)}$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ .

Sendo  $u(x) = \phi(x)e^{-i\omega x}$  uma função com o mesmo período do potencial, tem-se que  $u(-a) = u(b)$  e  $u'(-a) = u'(b)$ . Consequentemente,  $Ce^{-(\gamma - i\omega)a} + De^{(\gamma + i\omega)a} = Ae^{i(k - \omega)b} + Be^{-i(k + \omega)b}$  e  $(\gamma - i\omega)Ce^{-(\gamma - i\omega)a} - (\gamma + i\omega)De^{(\gamma + i\omega)a} = i(k - \omega)Ae^{i(k - \omega)b} - i(k + \omega)Be^{-i(k + \omega)b}$ . De maneira matricial,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ ik & -ik & -\gamma & \gamma \\ e^{i(k - \omega)b} & e^{-i(k + \omega)b} & -e^{-(\gamma - i\omega)a} & -e^{(\gamma + i\omega)a} \\ i(k - \omega)e^{i(k - \omega)b} & -i(k + \omega)e^{-i(k + \omega)b} & -(\gamma - i\omega)e^{-(\gamma - i\omega)a} & (\gamma + i\omega)e^{(\gamma + i\omega)a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para que o sistema tenha uma solução não trivial, é necessário que o determinante dessa matriz seja nulo. Ou seja,

$$\cos(kb) \cosh(\gamma a) + \left( \frac{\gamma^2 - k^2}{2k\gamma} \right) \sin(kb) \sinh(\gamma a) = \cos(\omega_n(a + b)), \quad (4)$$

com  $\omega = \omega_n = \frac{2\pi n}{N(a + b)}$ . As solução da Eq. (4) resulta na estrutura de bandas, já que para diferentes valores de energia (ou  $\gamma$  e  $k$ ) a função do lado esquerdo pode ser maior que 1, caindo fora da imagem de  $\cos(\omega_n(a + b))$  (o lado direito) e limitando certos valores de energia. Note que o fato de  $\omega_n$  ser discreto, implica em valores discretos para as energias. Entretanto, no limite  $N \rightarrow \infty$ ,  $\omega_n$  tende para uma variável contínua e, consequentemente, as energias permitidas pela Eq. (4) formam um contínuo que tem um valor mínimo e máximo. Essas são as bandas de energia.

## 1.5 Problema unidimensional de $N$ barreiras uniformes

Dado um potencial periódico de  $N$ -barreiras uniformes, assim como no caso anterior, mas agora queremos resolver a equação de Schrödinger para calcular a transmissão de uma onda em função de sua energia. Assim como antes o potencial é dado por

$$V(x) = \begin{cases} W, & j(a+b) \leq x < j(a+b) + a, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

com  $j = \{0, \dots, N-1\}$  (vide Fig. 3).

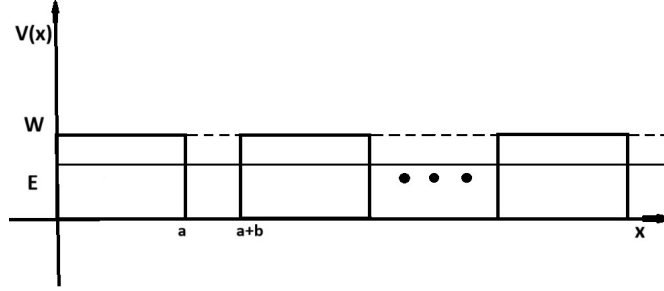


Figura 3: Esquema da forma do potencial de barreiras.

Supondo  $0 < E < W$ , com  $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(W-E)}$  e  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ , a solução geral é da forma

$$\phi(x) = \begin{cases} Q_j e^{\gamma x} + P_j e^{-\gamma x}, & j(a+b) \leq x < j(a+b) + a, \\ U_j e^{ikx} + V_j e^{-ikx}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Pela continuidade de  $\phi$  e sua derivada, é possível calcular cada um destes coeficientes. Essa é uma tarefa tediosa que é obtida mais convenientemente definindo  $A_n \equiv U_j e^{ikx}$ ,  $A_{n+1} \equiv U_j e^{ik(x+b)}$ ,  $R_n \equiv V_j e^{-ikx}$ ,  $R_{n+1} \equiv V_j e^{-ik(x+b)}$ ,  $C_n \equiv Q_j e^{\gamma x}$ ,  $C_{n+1} \equiv Q_j e^{\gamma(x+a)}$ ,  $D_n \equiv P_j e^{-\gamma x}$  e  $D_{n+1} \equiv P_j e^{-\gamma(x+a)}$ . De maneira concisa,

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ R_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ R_n \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} C_{n+1} \\ D_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\gamma a} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix}.$$

Assim foi desenvolvida as relações entre os pontos da rede que estão fora das barreiras de potencial. Agora, a parte mais difícil, que é “entrar” e “sair” de uma das barreiras de potencial, ou seja, relacionar as constantes dentro e fora das barreiras. Pela continuidade de  $\phi$  em  $x = n(a+b)$  (lado esquerdo das barreiras),  $A_{n+1} + R_{n+1} = C_n + D_n$  e  $ik(A_{n+1} - R_{n+1}) = \gamma(C_n - D_n)$ . Na forma matricial, temos que

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ R_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \gamma & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ R_{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\gamma}{ik} & 1 - \frac{\gamma}{ik} \\ 1 - \frac{\gamma}{ik} & 1 + \frac{\gamma}{ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix}.$$

Já em  $x = n(a+b) + a$  (lado direito das barreiras),  $C_{n+1} + D_{n+1} = A_{n+2} + R_{n+2}$  e  $\gamma(C_{n+1} - D_{n+1}) = ik(A_{n+2} - R_{n+2})$ . Ou seja,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \gamma & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{n+1} \\ D_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+2} \\ R_{n+2} \end{pmatrix}.$$

Combinando essas matrizes obtém-se

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_{n+2} \\ R_{n+2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \gamma & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\gamma a} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \gamma & -\gamma \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ R_n \end{pmatrix}, \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} A_{n+2} \\ R_{n+2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{ikb} \left( \cosh(a\gamma) + \frac{i(k^2 - \gamma^2)}{2k\gamma} \sinh(a\gamma) \right) & -\frac{i(k^2 + \gamma^2)e^{-ikb} \sinh(\gamma a)}{2k\gamma} \\ \frac{i(k^2 + \gamma^2)e^{ikb} \sinh(\gamma a)}{2k\gamma} & e^{-ikb} \left( \cosh(a\gamma) - \frac{i(k^2 - \gamma^2)}{2k\gamma} \sinh(a\gamma) \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ R_n \end{pmatrix} \\ &\equiv M^{-1} \begin{pmatrix} A_n \\ R_n \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

que determina a matriz de transferência discutida na Sec. 1.3 de forma genérica. Como mostrado anteriormente, a vantagem de uma matriz de transferência é que pode ser encadeada para encontrar os coeficientes mais extremos do sistema, de forma que  $\begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix} = M^{-n} \begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix}$ . Finalmente,

$$M = \begin{pmatrix} e^{-ikb} \left( \cosh(a\gamma) - \frac{i(k^2 - \gamma^2)}{2k\gamma} \sinh(a\gamma) \right) & \frac{i(k^2 + \gamma^2)e^{-ikb} \sinh(\gamma a)}{2k\gamma} \\ -\frac{i(k^2 + \gamma^2)e^{ikb} \sinh(\gamma a)}{2k\gamma} & e^{ikb} \left( \cosh(a\gamma) + \frac{i(k^2 - \gamma^2)}{2k\gamma} \sinh(a\gamma) \right) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Já para o caso de  $E > W$  basta tomar  $\gamma$  como complexo, assim é possível aproveitar o resultado obtido. Porém para  $E = W$  é necessário tomar o limite com  $\gamma \rightarrow 0$  e obtém-se

$$M = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{ika}{2}\right)e^{-ikb} & \frac{ika}{2}e^{-ikb} \\ -\frac{ika}{2}e^{ikb} & \left(1 + \frac{ika}{2}\right)e^{ikb} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

De forma que  $\begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix} = M^N \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix}$ , já que todas as matrizes de transferência são iguais por conta do “truque” feito com as fases dos coeficientes. Assim, basta diagonalizar  $M$  para encontrar de forma exata a transmitância em função da energia.

Diagonalizar a matriz  $M \equiv \begin{pmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{pmatrix}$  se torna simples, considerando que tem dimensão  $2 \times 2$ . Os auto-valores são

$$\lambda_{\pm} = \frac{m_1 + m_4}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{m_1 + m_4}{2}\right)^2 - 1}, \quad (7)$$

onde usamos que  $\det M = 1$ . Ou seja,

$$\lambda_{\pm} = u \pm \sqrt{u^2 - 1}, \text{ com } u = \cosh(a\gamma) \cos(kb) - \frac{(k^2 - \gamma^2)}{2k\gamma} \sinh(a\gamma) \sin(kb). \quad (8)$$

Sendo a matriz de auto-vetores (não normalizados) igual a

$$V = \begin{pmatrix} 1 & -v \\ v & 1 \end{pmatrix}, \text{ tal que } \begin{pmatrix} m_1 - \lambda_+ & m_2 \\ m_3 & m_4 - \lambda_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ v \end{pmatrix} = 0,$$

então

$$\begin{aligned} v &= \frac{\lambda_+ - m_4}{m_3}, \\ &= \frac{k\gamma e^{ikb}}{(k^2 + \gamma^2) \sinh(\gamma a)} \left( 2 \cosh(a\gamma) \sin(kb) - \frac{(k^2 - \gamma^2)}{k\gamma} \sinh(a\gamma) \cos(kb) + \right. \\ &\quad \left. - 2i \sqrt{(\cosh(a\gamma) \cos(kb) - \frac{(k^2 - \gamma^2)}{2k\gamma} \sinh(a\gamma) \sin(kb))^2 - 1} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} M^N &= V \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} V^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -v \\ v & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{1+v^2} & \frac{v}{1+v^2} \\ \frac{-v}{1+v^2} & \frac{1}{1+v^2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{1+v^2} \begin{pmatrix} 1 & -v \\ v & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^N & \lambda_+^N v \\ -\lambda_-^N v & \lambda_-^N \end{pmatrix} = \frac{1}{1+v^2} \begin{pmatrix} \lambda_+^N + \lambda_-^N v^2 & (\lambda_+^N - \lambda_-^N) v \\ (\lambda_+^N - \lambda_-^N) v & \lambda_+^N v^2 + \lambda_-^N \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10)$$

Consequentemente, a transmitância é

$$\mathcal{T} \equiv \left| \frac{T}{A} \right|^2 = \frac{1}{(M^N)_{1,1}} = \left| \frac{1+v^2}{\lambda_+^N + \lambda_-^N v^2} \right|^2, \quad (11)$$

e a refletância é  $\mathcal{R} \equiv \left| \frac{R}{A} \right|^2 = 1 - \mathcal{T}$ . No caso de um número finito de barreiras, a transmitância da partícula em termos da energia também resulta no padrão de bandas e *gaps* análogo ao caso de barreiras em um anel (condições periódicas de contorno). Conforme o número de barreiras tende a infinito, o conjunto de energias permitidas se torna um conjunto contínuo. Neste mesmo limite, recupera-se o teorema de Bloch para condições abertas de contorno. Sendo assim, não é surpreendente que tenhamos obtido o padrão de bandas e *gaps* análogos ao do caso com condições periódicas de contorno.

Finalmente, queremos apontar para o fato de que, no limite  $N \rightarrow \infty$ , há uma forte evidência de que a transmitância  $\mathcal{T} \rightarrow 1$  nas bandas de energia e  $\mathcal{T} \rightarrow 0$  caso contrário (nos *gaps* de energia). Pela Eq. (11), isso é possível se  $\lambda_{\pm}^N = 1$ , ou seja,  $\lambda_{\pm} = e^{\pm i \frac{2\pi}{N} m_{\pm}}$ , com  $m_{\pm} \in \mathbb{Z}$ . Voltaremos a discutir sobre esse assunto a seguir.

## 1.6 $N$ barreiras em um anel: da matriz transferência para o teorema de Bloch

Para incluir condições periódicas de contorno na função de onda e no potencial, basta exigir que a matriz “total” de transferência (10) seja  $M^N = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Sendo assim, temos que  $\begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix} = M^N \begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix}$  e a função de onda se torna periódica no comprimento do anel. Então,

$$M^N = \frac{1}{1+v^2} \begin{pmatrix} \lambda_+^N + \lambda_-^N v^2 & (\lambda_+^N - \lambda_-^N) v \\ (\lambda_+^N - \lambda_-^N) v & \lambda_+^N v^2 + \lambda_-^N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Pode-se ver que, dos elementos fora da diagonal de matriz,  $\lambda_+^N = \lambda_-^N \implies \lambda_+ = \lambda_- e^{i2\pi m/N}$  com  $m \in \mathbb{Z}$ . Além disso, os elementos da diagonal da matriz exigem que  $\lambda_+^N = \lambda_-^N = 1$  e, portanto,

$$\lambda_{\pm} = e^{i\frac{2\pi}{N}m_{\pm}} = \cos\left(\frac{2\pi m_{\pm}}{N}\right) + i \sin\left(\frac{2\pi m_{\pm}}{N}\right). \quad (12)$$

Como  $\lambda_{\pm} = u \pm \sqrt{u^2 - 1}$ , vide Eq. (8), a Eq. (12) só pode ser satisfeita se e somente se  $u^2 \leq 1$ . Além disso,  $u \in \mathbb{R}$  para qualquer valor de energia ( $\gamma$  imaginário ou real). Sendo assim, pode-se reescrever  $\lambda_{\pm} = u \pm i\sqrt{1 - u^2}$ . Para satisfazer (12), então  $u = \cos(\frac{2\pi m_{\pm}}{N})$ . Esta é exatamente a equação de bandas e *gaps* obtida pelo teorema de Bloch Eq. (4).

Note que ao impormos  $M^N = \mathbb{I}$ , estamos garantindo que a transmitância  $\mathcal{T} = 1$  nas bandas de energia. Como mostrado acima, isso acontece quando  $\lambda_{\pm}^N = 1$ . Note que também obtivemos  $\mathcal{T} = 1$  para o caso de condições abertas de contorno e  $N \rightarrow \infty$ . Além disso, também obtivemos que  $\lambda_{\pm}^N = 1$  naquele caso. Isso quer dizer que, para os propósitos de análise de bandas, *gaps* de energia e transmissão, os resultados são independentes da condição de contorno utilizada quando  $N \rightarrow \infty$ .

## 2 Barreiras aleatórias e a localização de Anderson

Estudado o caso limpo da transmitância de uma partícula não interagente em um potencial periódico, vamos agora estudar o caso onde são adicionadas inhomogeneidades no potencial, tornando alguns dos parâmetros das barreiras aleatórios (distância entre elas e sua altura, por exemplo). Este seria um modelo simplificado para elétrons numa rede cristalina com impurezas distribuídas aleatoriamente.

Como ficará evidente, o estudo a seguir verifica uma queda exponencial na transmissão do elétron que interpretamos como a localização de sua função de onda. Assim, com uma modificação simples no modelo de Kronig-Penney, pode-se observar o fenômeno da localização de Anderson.

### 2.1 Cálculos computacionais

Utilizando a matriz de transmissão Eq. (5) é possível calcular computacionalmente a transmissão do sistema para uma dada energia do elétron no cristal. A diferença para o caso aleatório é que a matriz transmissão não é mais uniforme, e depende localmente dos parâmetros de cada barreira, a saber, a distância entre elas  $b_i$ , sua largura  $a_i$  e altura  $W_i$ , para uma dada energia fixa (vide Fig. 3).

Agora só nos resta resolver para a amplitude de transmitância e refletância com as equações (5) se  $E = W$  e (6) se  $E \neq W$ , temos então

$$\begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^N M(a_j, b_j, W_j) \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Infelizmente, não fomos capazes de resolver esse sistema de equações analiticamente. Mas podemos multiplicar as matrizes de transmissão numericamente. Nos casos a seguir foram variados aleatoriamente apenas a distância entre as barreiras  $M(a_j, b_j, W_j) = M(a, b_j, W)$ . Relatamos que fizemos também o estudo variando a altura  $W$  das barreiras e obtivemos qualitativamente o mesmo resultado. Por brevidade, não mostraremos esse estudo aqui.

Por fim, foram utilizadas unidades adimensionais,  $W = \hbar = m = 1$ ,  $a = 2$  e  $b$  sendo uma variável aleatória uniformemente distribuída entre 0 e 1.

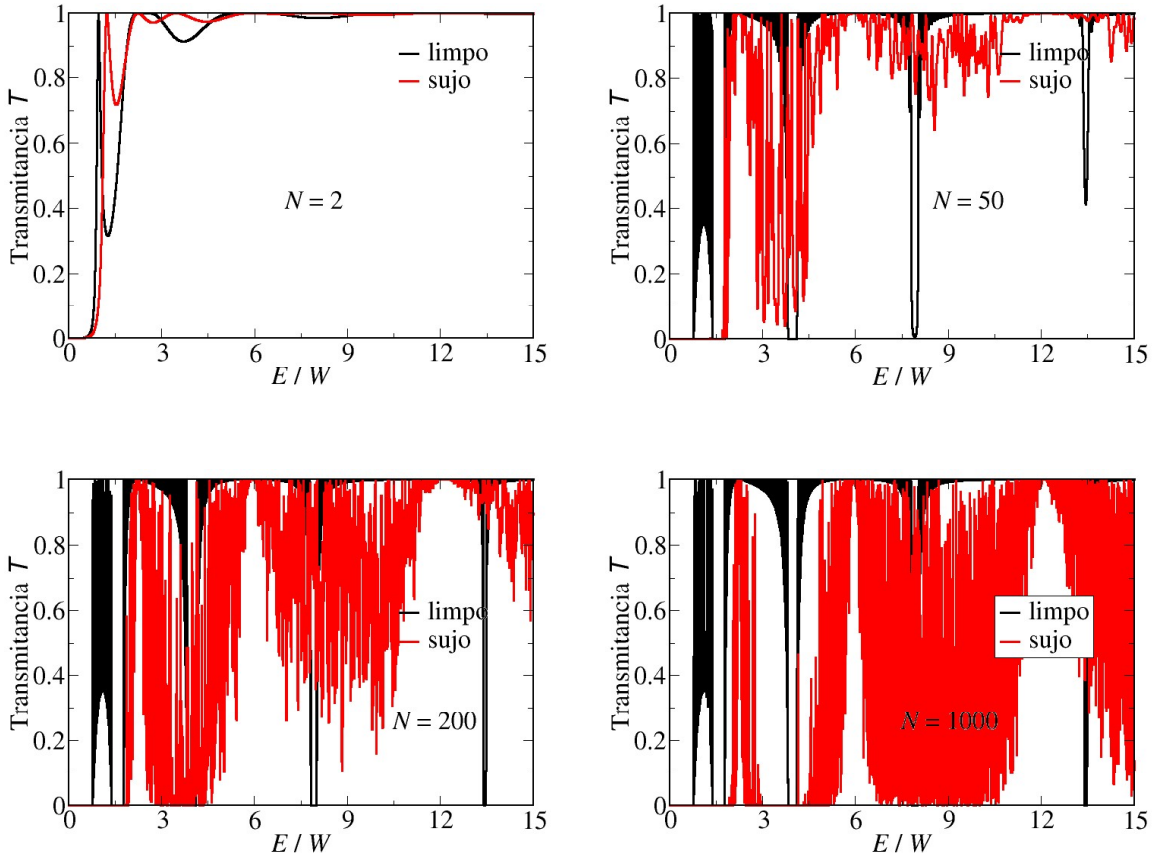


Figura 4: Gráficos da transmitância  $\mathcal{T} = |T/A|^2$  [vide Eq. (13)] como função da energia para os casos de  $N = 2, 50, 200$  e  $1000$  barreiras. A curva preta se refere ao caso de barreiras uniformes ( $b = 0.5$ ) e a curva vermelha se refere ao caso de barreiras aleatórias com  $b$  sendo uma variável aleatória uniformemente distribuída entre 0 e 1. Em todos os casos, utilizamos  $W = \hbar = m = 1$ ,  $a = 2$  (vide Fig. 3).

A Fig. 4 mostra a transmitância  $\mathcal{T} = |T/A|^2$  [vide Eq. (13)] como função da energia para os casos de  $N = 2, 50, 200$  e  $1000$  barreiras (curva vermelha). Para comparação, mostramos também (curva preta) o caso de barreiras uniformes ( $b = 0.5$ , o valor médio dos  $b$ 's no caso sujo). Ao aumentar o número de barreiras, é possível observar graficamente um comportamento completamente distinto entre os casos limpo e sujo. Primeiro, o *gap* de energia do sistema limpo é preenchido com estados permitidos. Segundo, todos os estados permitidos têm sua transmitância drasticamente diminuída. Ou seja, quanto mais barreiras desordenadas, mais a função de onda não transmite (que interpretamos como sendo localizada), com a transmitância indo a zero para qualquer energia no limite  $N \rightarrow \infty$ . Em primeira vista, parece que  $\mathcal{T} \approx 1$  para  $E \approx 2.5W$ ,  $E \approx 6W$  e  $E \approx 12W$  para o caso de  $N = 10^3$  barreiras. Entretanto, verificamos que  $\mathcal{T}$  diminui para sistemas maiores. O fato de  $\mathcal{T}$  ser da ordem de 1 é consequência de que o comprimento de localização para essas energias é maior do que o tamanho do sistema.

Para uma análise mais completa de nossos resultados, podem ser feitos histogramas da resistência para um dado comprimento  $N$  do sistema e energia  $E$  fixa, sendo a resistência adimensional definida por [4]

$$\rho = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{T}} = \frac{1}{\mathcal{T}} - 1.$$

Se  $\rho \rightarrow \infty \Leftrightarrow \mathcal{T} \rightarrow 0$ . Calculando  $\rho$  para várias realizações aleatórias do sistema, podem ser feitos histogramas para a resistência (vide Fig. 5).

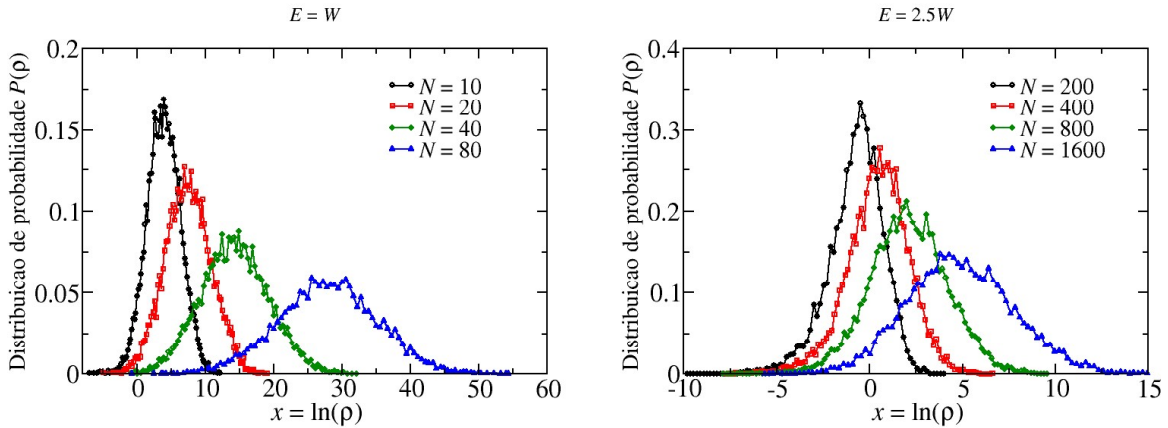


Figura 5: Histogramas normalizados da resistência adimensional do fio  $\rho$  (em escala logarítmica) para energias  $E = W$  e  $E = 2.5W$ , variando para diferentes comprimentos  $N$  do sistema. Os histogramas foram feitos utilizando  $10^4$  realizações de desordem, ou seja, calculou-se  $\rho$  para  $10^4$  fios distintos.

A Fig. 5 traz nossos resultados para a distribuição de probabilidade do logaritmo da resistência  $\rho$  para diferentes valores de tamanho do sistema  $N$ . Note a forma de uma gaussiana em acordo com a expectativa da Ref. [4]. Note ainda como a distribuição se

alarga quando o tamanho do sistema aumenta mesmo em escala logarítmica. Isso quer dizer que a distribuição em escala linear é extremamente larga e, conseqüentemente, a média da distribuição deixa de ser representativa. Por isso, utiliza-se o valor típico  $\rho_{\text{tip}} = \exp(\overline{\ln \rho})$  e estuda-se a distribuição do logaritmo de  $\rho$ .

Desejamos agora entender como o valor típico e a variância associada dependem do comprimento do sistema  $N$ . Para funções de ondas localizadas, i.e.,  $\psi(x) \sim e^{-|x-x_0|/\xi}$ , onde  $x_0$  é o centro localizador e  $\xi$  é o comprimento de localização associado, tem-se que  $\overline{\ln \rho} \sim N$ .

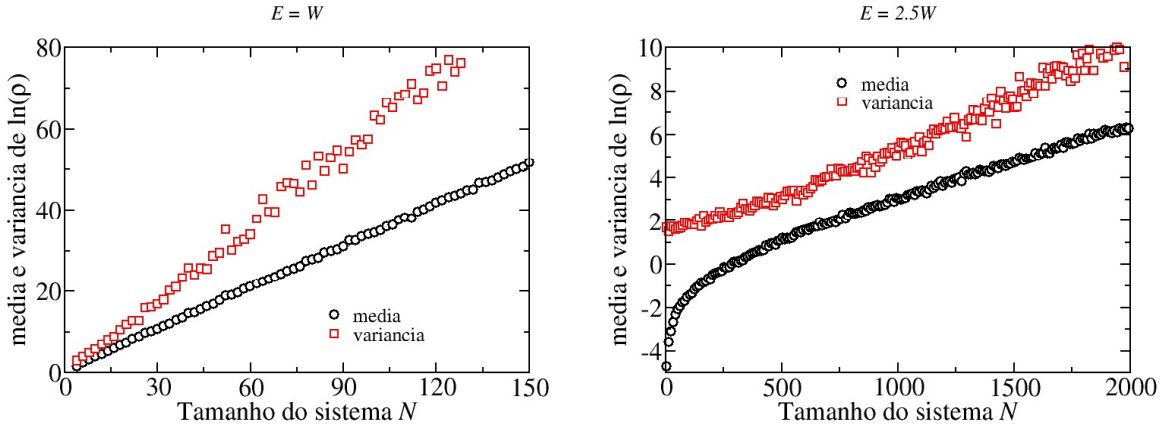


Figura 6: Gráficos da média e desvio padrão de  $\ln \rho$  como função do tamanho do sistema  $N$  para energias  $E = W$  e  $E = 2.5W$ .

Na Fig. 6, mostramos nossos resultados da média e variância de  $\ln \rho$ ,  $\overline{\ln \rho}$  e  $\sigma_{\ln \rho}^2 = \overline{(\ln \rho)^2} - (\overline{\ln \rho})^2$ , respectivamente, como função de  $N$ . Tanto a média quanto a variância crescem linearmente com  $N$ , para  $N >$  comprimento de localização suficientemente grande. Este é um comportamento típico da localização da função de onda.

Para a energia  $E = 2.5W$ , note que a média e variância não variam linearmente para tamanhos pequenos. Além disso, a resistência é pequena (como pode-se ver na Fig. 4). Como mencionado anteriormente, o comprimento de localização para esta energia é grande  $\approx 400$ , a partir do qual  $\overline{\ln \rho}$  e  $\sigma_{\ln \rho}^2$  passam a variar linearmente com  $N$ .

### 3 Modelo tight-binding

Anteriormente exploramos a estrutura de bandas e gaps e a localização de Anderson no formalismo de primeira quantização. Agora vamos refazer esse estudo em segunda quantização utilizando o modelo de tight-binding.

### 3.1 Modelo em 2ª quantização

Primeiramente, é possível “deduzir” ou justificar o modelo tight-binding pensando em como os diferentes orbitais eletrônicos se relacionam, principalmente com seus vizinhos. Aproximando esses estados como gaussianas localizadas em torno dos vales do potencial cristalino,  $\langle x | n \rangle \propto e^{-(x-na)^2/\sigma^2}$  de forma que diferentes orbitais possuem interseção apenas entre primeiros vizinhos. Ou seja,  $\langle m | H | n \rangle = 0$  se  $|m - n| > 1$ . Para primeiros vizinhos,  $\langle n \pm 1 | H | n \rangle = \langle n \pm 1 | T | n \rangle + \langle n \pm 1 | V(x) | n \rangle$  de forma que  $V(x)$  é um potencial periódico e  $V_{m,n}$  é dado por

$$\langle m | V(x) | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) V(x) \psi_n(x) \approx \begin{cases} V_n & m = n \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}.$$

Porém, aproximamos  $T_{m,n} = \frac{\hbar^2}{2m} p_{m,n}^2$  como não nulo apenas para orbitais no mesmo sítio, de forma que

$$\langle m | T | n \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \psi_n''(x) \approx \begin{cases} \varepsilon_0 & m = n \\ -t_n & m = n \pm 1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}.$$

Ou seja, podemos escrever  $\langle m | H | n \rangle = H_{m,n} = \varepsilon_n \delta_{m,n} - t_n (\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m})$ , sendo  $\varepsilon_n = \varepsilon_0 + V_n$ , de forma que

$$H = \sum_{m,n} c_m^\dagger H_{m,n} c_n = \sum_{m,n} c_m^\dagger \varepsilon_n \delta_{m,n} c_n - \sum_{m,n} t_n c_m^\dagger (\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}) c_n,$$

chegamos então que em segunda quantização

$$H = \sum_n [\varepsilon_n c_n^\dagger c_n - t_n (c_{n+1}^\dagger c_n + h.c.)].$$

### 3.2 Diagonalização do caso cristalino

Com essa devida motivação para o modelo tight-binding feita, podemos diagonalizar o sistema para o caso sem desordem, com todos os parâmetros de “hopping”  $t_n = t$  e de cada sítio  $\varepsilon_n = \varepsilon$  iguais. Temos então

$$H = \sum_{n=1}^L \varepsilon c_n^\dagger c_n + \sum_{n=1}^L t (c_n^\dagger c_{n+1} + h.c.), \quad (14)$$

considerando condições de contorno periódicas  $c_{n+L} = c_n$ . Para diagonalizar esse sistema é necessário fazer uma “transformada de Fourier”, dada por  $d_k \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n e^{-ikna} c_n$ . Aplicando as condições de contorno, temos que  $d_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n e^{-ik(n+L)a} c_{n+L} \implies e^{-ik(n+L)a} = e^{-ikna}$ , então  $e^{-ikLa} = 1 = e^{i2\pi m}$  e  $k_m = 2\pi m/(La)$ , com  $m = 1, \dots, L$ . Assim é possível inverter essa transformada, considerando a seguinte relação proveniente da série geométrica,

$$\frac{1}{L} \sum_{m=1}^L e^{i2\pi \frac{(n'-n)}{L} m} = \delta_{n',n}. \quad (15)$$

Com isso segue que  $c_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikna} d_k$ , substituindo em (14), temos que

$$\sum_{n=1}^L c_n^+ c_n = \sum_{n=1}^L \frac{1}{L} \sum_{k,k'} e^{i(k'-k)na} d_k^+ d_{k'} = \sum_{k,k'} \left( \frac{1}{L} \sum_{n=1}^L e^{i(k'-k)na} \right) d_k^+ d_{k'} = \sum_{k,k'} \delta_{k,k'} d_k^+ d_{k'} = \sum_k d_k^+ d_k.$$

Da mesma forma,

$$\sum_{n=1}^L c_n^+ c_{n+1} = \sum_{n=1}^L \frac{1}{L} \sum_{k,k'} e^{-ikna} d_k^+ e^{ik'(n+1)a} d_{k'} = \sum_k e^{ika} d_k^+ d_k,$$

logo conclui-se que

$$\sum_{n=1}^L c_n^+ c_{n+1} + h.c. = \sum_k (e^{ika} + e^{-ika}) d_k^+ d_k = \sum_k 2 \cos(ka) d_k^+ d_k.$$

Assim temos o Hamiltoniano diagonalizado exatamente, dado por

$$H = \sum_k (\varepsilon + 2 \cos(ka)) d_k^+ d_k,$$

com autoestados de ondas estendidas por todo o anel cristalino,  $|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n e^{-ikna} c_n^+ |0\rangle$ . Nesse caso notamos que existe apenas uma banda de energia, dada por  $\varepsilon_k = \varepsilon + 2\cos(ka)$ , com  $0 < k \leq 2\pi/a$ .

## Bandas e gaps de energia no modelo tight-binding

Podemos também construir uma outra estrutura para o cristal, definindo os termos de cada sítio como  $\varepsilon_n$  par =  $\varepsilon_a$  e  $\varepsilon_n$  ímpar =  $\varepsilon_b$ . Perceba que se  $\varepsilon_a = \varepsilon_b$ , retornamos ao caso anterior. Dessa forma agora temos o Hamiltoniano

$$H = \sum_{n=1}^L [\varepsilon_n c_n^+ c_n + t(c_n^+ c_{n+1} + h.c.)] = \sum_{n \text{ par}} \varepsilon_a c_n^+ c_n + \sum_{n \text{ ímpar}} \varepsilon_b c_n^+ c_n + \sum_{n=1}^L t(c_n^+ c_{n+1} + h.c.).$$

Assim como no caso anterior definimos uma transformada de Fourier para diagonalizar o sistema como  $d_k \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n e^{-ikna} c_n$ , porém somando separadamente nos sítios pares e ímpares,

$$a_k \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{L/2} e^{-ik2na} c_{2n} \quad , \quad b_k \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{L/2} e^{-ik(2n-1)a} c_{2n-1} \quad .$$

Aplicando condições de contorno periódicas dadas por  $c_{n+L} = c_n$ , temos que  $k_m = 2\pi m/(La)$ , tal que  $m = 1, \dots, L/2$ .

Utilizando a relação (15),  $\frac{2}{L} \sum_{m=1}^{L/2} e^{i\pi \frac{(n'-n)}{L} m} = \delta_{n',n}$ , podemos inverter as transformadas para isolar os  $c_n$ ,

$$c_{2n} \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_k e^{ik2na} a_k, \quad c_{2n-1} \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_k e^{ik(2n-1)a} b_k.$$

Substituindo no Hamiltoniano e utilizando novamente a identidade (15), concluímos que

$$H = \sum_k \varepsilon_a a_k^+ a_k + \varepsilon_b b_k^+ b_k + 2t \cos(ka) (a_k^+ b_k + b_k^+ a_k) = \sum_k \begin{pmatrix} a_k^+ & b_k^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_a & 2t \cos(ka) \\ 2t \cos(ka) & \varepsilon_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando essa matriz, temos

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_a & 2t \cos(ka) \\ 2t \cos(ka) & \varepsilon_b \end{pmatrix} = V \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_a - \varepsilon_b}{2}\right)^2 + 4t^2 \cos^2(ka)} & 0 \\ 0 & \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_a - \varepsilon_b}{2}\right)^2 + 4t^2 \cos^2(ka)} \end{pmatrix} V^T,$$

então definimos uma nova base  $\alpha_k$  e  $\beta_k$  de forma que  $\begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_k \end{pmatrix} = V^T \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$ .

Assim diagonalizamos o sistema, dado por

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} \alpha_k^+ & \beta_k^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_\alpha(k) & 0 \\ 0 & \varepsilon_\beta(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_k \end{pmatrix} = \sum_k \varepsilon_\alpha(k) \alpha_k^+ \alpha_k + \varepsilon_\beta(k) \beta_k^+ \beta_k,$$

sendo as auto-energias do sistema  $\varepsilon_\alpha(k) = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_a - \varepsilon_b}{2}\right)^2 + 4t^2 \cos^2(ka)}$  e

$\varepsilon_\beta(k) = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_a - \varepsilon_b}{2}\right)^2 + 4t^2 \cos^2(ka)}$ .

Com isso é possível notar o aparecimento de duas bandas de energia e um gap entre elas, apenas mudando a estrutura periódica do sistema em questão. Também é possível

calcular os autoestados do sistema, dados por ondas estendidas como no caso anterior.

Na figura 7 das bandas de energia nos dois casos calculados acima, no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ), ou seja, quando os níveis de energia se tornam contínuos. Fizemos uma redefinição de  $k$ , como estando na faixa  $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$  e  $-\pi/(2a) \leq k \leq \pi/(2a)$  respectivamente, para melhor visualização da estrutura de bandas nas duas redes cristalinas, considerando  $t = 1$ ,  $a = 1$ ,  $\varepsilon_a = 1$  e  $\varepsilon_b = -1$ .

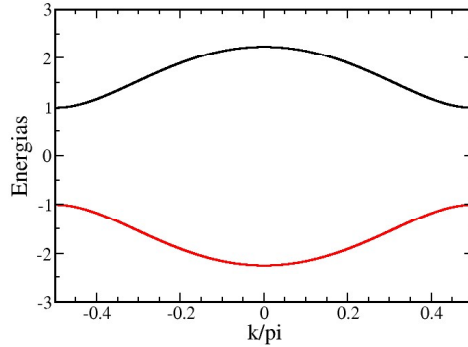


Figura 7: Gráficos das energias permitidas no caso  $\varepsilon_{n \text{ par}} = \varepsilon_a$ ,  $\varepsilon_{n \text{ ímpar}} = \varepsilon_b$ .

### 3.3 Diagonalização do modelo de Aubry-André

Como foi visto anteriormente, introduzindo uma estrutura um pouco mais complexa no cristal (átomos com duas energias diferentes nos sítios), criou já uma estrutura simples de bandas e gaps. Agora faremos uma estrutura bem mais complexa, intruduzindo energias quasi-aleatórias em cada sítio  $\varepsilon_n = -g\cos(2\pi\beta n)$  [6] em que  $\beta$  é um número irracional e os termos de “hopping” são uniformes como  $t_n = 1$ . Assim introduzimos uma desordem no sistema, resultando no Hamiltoniano

$$H = -g \sum_{n=1}^L \cos(2\pi\beta n) c_n^\dagger c_n - \sum_{n=1}^L (c_{n+1}^\dagger c_n + h.c.) = \vec{c}^\dagger \mathbb{M} \vec{c}.$$

Para diagonalizar o sistema, só precisamos então resolver o sistema

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & \varepsilon_2 & -1 & 0 & & 0 \\ 0 & -1 & & & & \vdots \\ \vdots & 0 & & \ddots & & 0 \\ 0 & & & & & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & \varepsilon_L \end{pmatrix}.$$

Como visto anteriormente, no caso cristalino os auto-estados são ondas estendidas por todo o sistema, porém quando disordem é introduzida, esperamos que os estados se tornem localizados por conta da localização de Anderson. Com isso cada estado deve, no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ), ser praticamente nulo em cada sítio com exceção de um, em que sua amplitude é praticamente 1, ou seja,  $|k\rangle \sim |m\rangle$ . Com isso em mente é útil definir a quantidade “Inverse Participation Ratio” ou “IPR”, para medir o quanto que cada autoestado  $k$  do sistema está localizado ou deslocalizado, dada por

$$\text{IPR}(k) = \sum_{n=1}^L \|\phi_n(k)\|^4 = \begin{cases} 1 & \text{se } \phi_n^k = \delta_{m,n} \text{ (estados localizados no sítio } m) \\ 1/L & \text{se } \phi_n^k = e^{-ikna}/\sqrt{L} \text{ (estados de ondas estendidas)} \end{cases}.$$

Sendo  $\phi_n^k = \langle n | k \rangle$  a amplitude da função de onda de cada auto-estado  $|k\rangle$  em cada sítio  $|n\rangle$ . Com isso podemos calcular o IPR de cada auto-estado, dado um “parâmetro de desordem”  $g$ . Esperamos que conforme ele aumente, os estados se tornem mais localizados, sendo que para  $g = 0$  retornamos a um sistema cristalino (comprimento de localização infinito), com todos os auto-estados estendidos.

Exemplificamos então o IPR para um sistema com  $g = 3$  e calculamos ainda o comprimento de localização  $\xi$  (através do “IPR”) desses estados, dado pelo inverso do menor IPR de cada sistema  $\xi^{-1} \propto \min\{\text{IPR}(k), \text{auto-estados } k\}$ , e comprovamos esta localização.

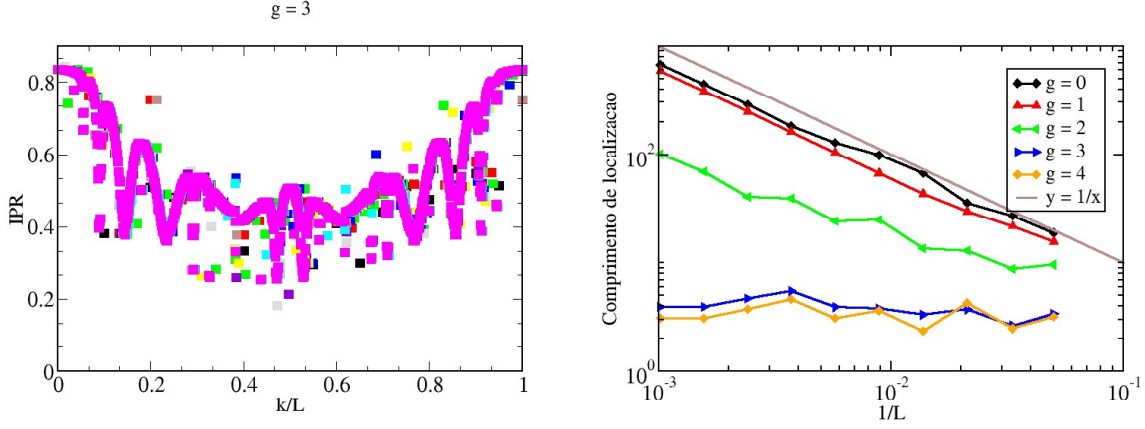


Figura 8: IPR de cada autoestado do sistema para diferentes comprimentos (at   $L = 987$  s tios) e comprimento de localiza  o (inverso do IPRmin) em fun  o do comprimento do sistema e  $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$

Para  $g = 3$  notamos que todos os auto-estados do sistema est o bem localizados, com seu IPR consideravelmente maior que  $1/987 \sim 0.001 \ll 0.2$ . Observa-se tamb m uma fase em que todos os estados s o estendidos, e outra em que todos eles s o localizados, com uma transi  o de fase que ocorre em  $g = 2$ . Verificamos que a fase de estados localizados possui bandas e gaps de energia distribu dos de maneira fractal.

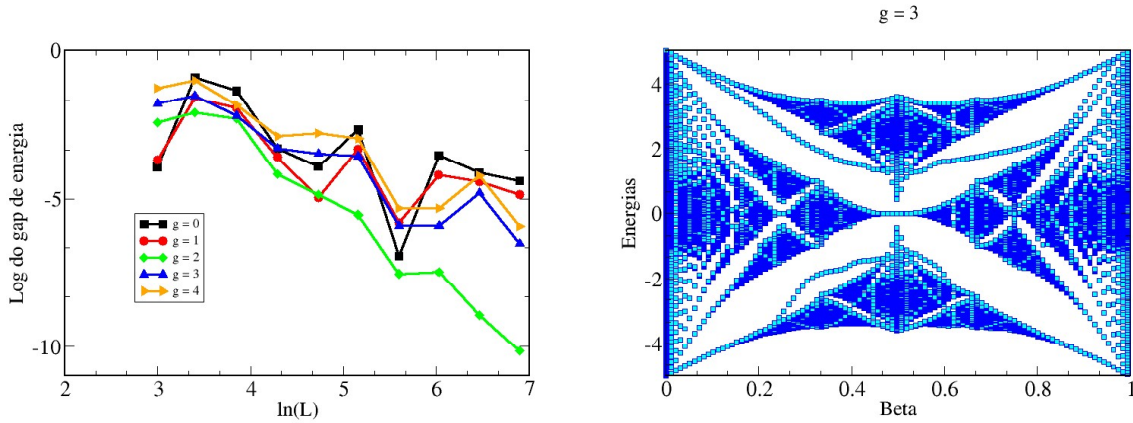


Figura 9: Log do gap no centro da banda de energia em fun  o do log do comprimento do sistema ( $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ ) e padr o fractal do espectro de energias em fun  o da frequ ncia  $\beta$  do cosseno –  $L = 987$  s tios

Calculamos tamb m a diferen a de duas energias no centro da banda de energia do sistema, para v rios valores do par metro de desordem  $g$  e  $L = 987$  s tios. No limite

termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ), o espectro de energia tende a ser contínuo (infinitos pontos), então se estivermos em uma banda essa diferença tenderá a zero e caso contrário, vai se aproximar a um valor fixo dado pelo tamanho do gap de energia. Então esperamos que a diferença  $dE \propto L^{-z}$  decaia exponencialmente conforme o tamanho do sistema aumenta, como foi mostrado na figura acima.

## Parte IV

# Conclusões

Utilizando o do modelo Kronig-Penney cristalino, verificamos a existência de bandas de gaps de energia. Este é um conceito importante para o entendimento de diversos metais e isolantes na natureza. No caso inhomogêneo aleatório, verificamos a localização dos estados estendidos evidenciando uma dramática mudança no comportamento da função de onda do elétron. Com a transmitância indo a zero e a resistência crescendo exponencialmente com o tamanho do sistema (ao contrário do esperado pela segunda lei de Ohm), indicando essa localização no fio, com diferentes comprimentos de localização para cada energia escolhida. Esse efeito de interferência destrutiva é muito forte em dimensões 1 e 2.

Através do modelo tight-binding cristalino (segunda quantização), também foi verificada a existência de bandas e gaps de energia. Estudando ainda o modelo de Aubry-André que é inhomogêneo mas não-aleatório, verificamos uma transição de fase metal—isolante de Anderson ao se aumentar a magnitude da aperiodicidade. Além disso, verificamos o espectro fractal das bandas de energia. Este é um aspecto comum em sistemas quasi-cristalinos.

## Referências

- [1] R. de L. Kronig and W. G. Penney, Proc. Roy. Soc. (London) A **130**, 499 (1931).
- [2] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [3] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [4] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
- [5] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Addison-Wesley, New York 1994).
- [6] A Domínguez-Castro and R Paredes Eur. J. Phys. **40** 045403 (2019).
- [7] Macêdo, Thales & Faundez, Julian & dos Santos, Raimundo & Costa, Natanael & Pinheiro, Felipe. (2024). Multifractal critical phase driven by coupling quasiperiodic systems to electromagnetic cavities. arXiv.2408.06496.