

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

ANTHONY SALES PEIXOTO

Dois Elétrons Interagentes em Cadeias Aperiódicas

Maceió – Brasil
Julho de 2014

ANTHONY SALES PEIXOTO

Dois Elétrons Interagentes em Cadeias Aperiódicas

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Curso de Pós-Graduação em Física da Matéria
Condensada da Universidade Federal de
Alagoas como requisito para obtenção do título
de Mestre em Física.

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

Maceió – Brasil
Julho de 2014

Dedico este trabalho
aos meus pais, Claudio Peixoto e Simone Sales,
aos meus irmãos Claudio Sales e José Sales
e a Silvia, minha companheira.
In memoriam de meus avós José Sales e Maria Lia.

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus, pela vida, pela força e por todas as boas oportunidades. Também agradeço a minha família: meus pais, Simone e Claudio, pelo amor, força e apoio; meus irmãos, Claudio e Sales, pelos bons momentos, conversas e jogatinas; à Silvia, pela presença constante na minha vida, pelo amor, compreensão, apoio e força. Dedico este trabalho à memória de meus avós, José Sales e Maria Lia, que sempre que sempre acreditaram no meu trabalho e me serviram como exemplos de pessoas fortes, esforçadas e honestas.

Às pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram com meu trabalho, meus sinceros agradecimentos:

Aos meus colegas, Ana, Débora, Elpídio, Elaine, Tainã, Jonathas, Edimilson e Leandro pelo companheirismo e bons momentos. A meu amigo Leônade, que percorre esse mesmo caminho ao meu lado desde o início de tudo.

Aos professores Wandearley, Socorro, Kléber, Tereza e Ornellas, pela confiança, incentivo e contribuições para minha formação profissional. Ao meu orientador, o professor Francisco Fidelis, pela paciência, incentivo e dedicação.

A CAPES, pelo apoio financeiro.

“O ontem é história. O amanhã é mistério.
Mas o hoje é uma dádiva. Por isso que se chama Presente!”
(Mestre Oogway - Filme Kung Fu Panda)

Resumo

Recentemente, a localização dinâmica e sua relação com elétrons interagentes tem despertado grande interesse para a Física, sendo objeto de vários estudos. Nesta Dissertação de Mestrado apresentamos estudos direcionados à dinâmica de dois elétrons interagentes que estão numa rede unidimensional, cuja distribuição de potenciais é aperiódica. Este tipo de distribuição tem como principal característica um comportamento que pode mudar entre o caso periódico e o caso aleatório. Empregando métodos numéricos e computacionais, resolvemos a equação de Schrödinger para estudar os auto-estados estacionários e a dinâmica do sistema, verificando a influência da interação entre os elétrons neste sistema. Na análise dos auto-estados observamos que a presença de interação promove um enfraquecimento da localização eletrônica induzida pela desordem, concordando com a literatura existente. Os aspectos dinâmicos dos elétrons mostram que a existência de um campo local, natural dessa distribuição de potenciais, promove uma oscilação do pacote de onda na fase estendida. Esta contribuição do campo local fica mais evidente quando os dois elétrons estão sujeitos a um campo elétrico externo, uma vez que a frequência das oscilações de Bloch é alterada em função das condições iniciais do sistema. A análise dos resultados numéricos serão tratados por meio de um formalismo semi-clássico, caracterizando as frequências de oscilações de Bloch para sistemas com dois elétrons em cadeias aperiódicas.

Abstract

Recently, the dynamic location and its relationship with interacting electrons has attracted great interest for Physics, being subject of several studies. In this Master's Degree dissertation we present targeted studies to two interacting electrons in a one-dimensional lattice, whose potentials distribution is aperiodic. This type of distribution is characterized by a behavior that change between the periodic and random case. Employing numerical and computational methods, we solve the Schrödinger equation to study the stationary eigenstates and the system dynamics, verifying the influence of the interactions between electrons in this system. In the analysis of eigenstates we observed that the presence of interaction promotes a weakening of electron localization induced by disorder, agreeing the existing literature. The dynamics aspects of the electrons show the existence of a local field, natural of this potential distribution, promotes an oscillation of the wave-packet in extended phase. The contribution of the local field becomes more evident when the two electrons are subject to an external electric field, since the frequency of Bloch's oscillations is altered in function of initial conditions of the system. The analysis of the numerical results will be treated trough of a semi-classical formalism, characterizing the frequencies of Bloch's oscillations to systems with two electrons in aperiodic chains.

Sumário

Dedicatória	2
Agradecimentos	3
Resumo	5
Abstract	6
Sumário	7
1 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	8
1.1 O Modelo de Elétrons Livres e Teoria de Bandas de Energia	9
1.2 O Modelo de Bloch	11
1.3 O Modelo de Anderson	14
1.3.1 Teoria de escala do modelo de Anderson	17
1.4 Dois Elétrons Interagentes em Redes Unidimensionais	19
1.4.1 O modelo de Anderson-Hubbard em redes unidimensionais com de- sordem	20
1.5 Aperiodicidade na Distribuição de Potenciais	24
2 DOIS ELÉTRONS INTERAGENTES EM UMA REDE APERIÓDICA UNIDIMENSIONAL	26
2.1 Potenciais Aperiódicos: Efeitos de Correlação	26
2.2 Resultados: Aspectos Estacionários	29
2.3 Resultados: Aspectos Dinâmicos	31
2.3.1 Oscilações de Bloch: efeitos do campo local	33
CONCLUSÕES	39
REFERÊNCIAS	41

1

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A condução elétrica nos metais vem sendo um grande objeto de estudo na comunidade científica, principalmente na área da Física da Matéria Condensada. Contudo, nem todos os sólidos na natureza apresentam esse comportamento metálico. Isso tem motivado diversos estudos, resultando na elaboração de trabalhos com modelos que tentam explicar como se dá a condução de elétrons nos sólidos.

Ainda no final do século XIX, quando a Física Moderna não estava bem desenvolvida, Paul K. Drude e Arnold J.W. Sommerfeld propuseram modelos baseados na teoria cinética dos gases [1, 2], tratando os elétrons como partículas. Nesses modelos, os íons são como esferas fixas, idênticas e não interagentes, enquanto que os elétrons não interagem entre si, apenas movendo-se livremente e colidindo contra os íons. Drude aplica a distribuição de Maxwell-Boltzmann para obter a velocidade média dos elétrons e, a partir disso, encontra a condutividade. Já Sommerfeld leva em consideração que os elétrons obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, aplicando a distribuição de Fermi-Dirac na obtenção da velocidade média. Ambos encontraram uma relação onde a condutância σ é inversamente proporcional à temperatura. Embora esse resultado concorde com a teoria, eles divergem dos resultados experimentais para a condutância dos metais. Além disso esses modelos não conseguem explicar o comportamento isolante que certos materiais apresentam.

Um dos motivos da falha desses modelos é fato de que eles não levam em conta a natureza ondulatória dos elétrons. Com as formulações da Mecânica Estatística e da Mecânica Quântica novos modelos foram desenvolvidos, considerando conceitos como função de onda eletrônica, a estrutura dos materiais e até mesmo a presença de impurezas.

A seguir serão discutidos alguns modelos que tentam explicar o fenômeno de condução. Em seguida será apresentado todo o formalismo físico matemático do Hamiltoniano de Anderson-Hubbard, o qual foi adotado em nosso estudo.

1.1 O Modelo de Elétrons Livres e Teoria de Bandas de Energia

No início do século XX começaram a ser desenvolvidas teorias quânticas de condução elétrica. Essas novas teorias empregam o conceito de *bandas de energia*, que leva em conta o modelo atômico proposto por Niels Bohr, em 1912. Segundo Bohr, os elétrons se movem ao redor dos núcleos em órbitas circulares. Cada órbita só permite elétrons com determinados valores de energia mecânica total, denominados *níveis de energia* [3, 4].

Os níveis de energia podem ser obtidos resolvendo o Modelo de Elétrons Livres. Esse modelo leva em conta a função de onda eletrônica e que os elétrons apenas possuem energia cinética. Assim, em uma dimensão, considerando um elétron de massa m confinado em um poço de potencial de largura L , seu Hamiltoniano é escrito como:

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (1.1)$$

onde o potencial é descrito segundo a expressão:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{outros casos} \end{cases}$$

Portanto, resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo, temos:

$$\begin{aligned} H\psi(x) &= E\psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= E\psi(x) \\ \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \end{aligned} \quad (1.2)$$

Tomando $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ em 1.2, então:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= -k^2 \psi(x) \\ \psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi(x) &= A[\cos(kx) + i \sin(kx)] + B[\cos(kx) - i \sin(kx)] \end{aligned} \quad (1.3)$$

Aplicando as condições de contorno do problema, $\psi(0) = 0$ e $\psi(L) = 0$, em 1.3 obtemos:

$$\begin{aligned} \psi(0) &= A + B = 0 \\ \psi(L) &= i(A - B) \sin(kL) = 0 \\ \sin(kL) &= \sin(n\pi) = 0 \end{aligned} \quad (1.4)$$

Assim, sendo $k = \frac{n\pi}{L}$, a energia é:

$$E_{n_x} = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} \frac{n_x^2}{L_x^2} \quad (1.5)$$

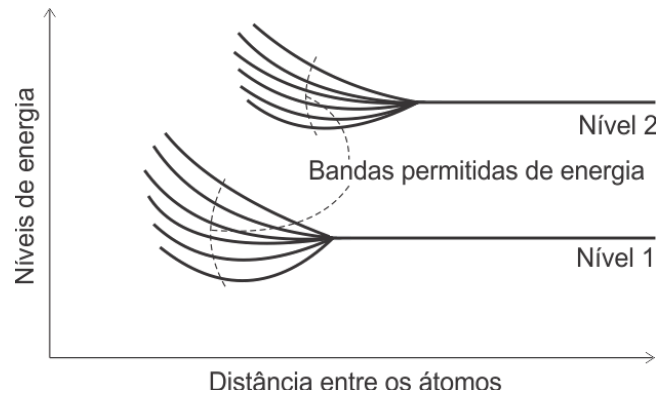
Analogamente, resolvendo o problema para três dimensões obtemos:

$$E_n = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (1.6)$$

Esse resultado caracteriza o nível de energia para um orbital eletrônico.

À medida que átomos idênticos ficam mais próximos, começa a ocorrer uma superposição dos níveis de energia. Isso faz com esses níveis se dividam em faixas de energia mais estreitas, chamadas de subníveis de energia. O conjunto formado por vários subníveis forma uma *banda de energia*. A figura 1.1 esquematiza o comportamento de dois níveis de energia para um sistema formado por seis átomos idênticos. As bandas mais energéticas

Figura 1.1: Níveis de energia em um sistema formado por seis átomos idênticos. Enquanto os átomos estão afastados, os dois níveis de energia permanecem o mesmo para todos os seis átomos. A medida que eles são colocados mais próximos uns dos outros, os níveis se dividem, apresentando diferenças entre os seis átomos.

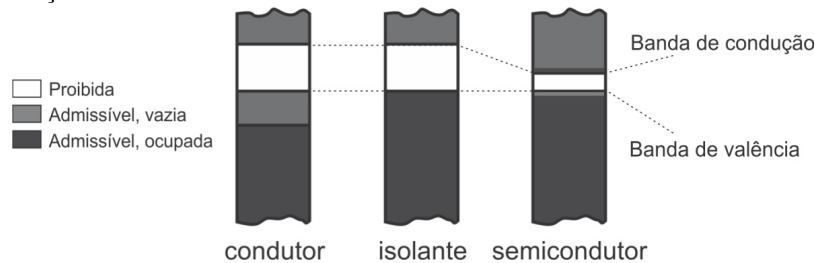


Fonte: Tipler (2006) [4].

são as *bandas de valência* e as menos energéticas são as *bandas de condução*. Além disso, existem valores de energia proibidos, formando lacunas que separam as bandas. Essas lacunas resultam da interação entre as funções de onda eletrônica e os núcleos, sendo chamadas de *bandas proibidas de energia*, ou *energy gaps*.

O estudo das bandas de energia é muito importante na compreensão da condução nos sólidos. A estrutura das bandas se apresentam de forma diferente para condutores, semicondutores e isolantes, como mostrado na figura 1.2. Com uma análise mais detalhada do modelo do elétron livre sob um potencial periódico é possível compreender melhor a diferença entre condutores e isolantes. Além disso, a estrutura dos sólidos também contribui com essa diferença. Isso motivou a formulação de novos modelos de condução, como o *Modelo de Bloch*, para sólidos perfeitamente cristalinos, e o *Modelo de Anderson*, para sólidos que apresentam alguma impureza em sua estrutura, como veremos adiante.

Figura 1.2: Bandas de energia de condutores, isolantes e semicondutores. Nos condutores a banda de valência (parte de baixo) está quase preenchida, sendo fácil excitar os elétrons para fazê-los saltar de uma banda para outra (parte de cima). Nos isolantes, a banda de valência está totalmente ocupada, não sendo possível excitar os elétrons para movê-los para a banda de condução (parte de cima). Os semicondutores apresentam a banda de valência quase totalmente ocupada e a banda de condução quase totalmente vazia, dificultando a condução de elétrons entre as bandas.

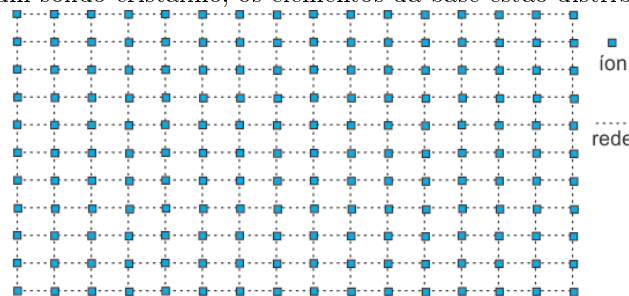


Fonte: Tipler (2006) [4].

1.2 O Modelo de Bloch

Quando imaginamos um sólido, pensamos em uma estrutura espacial, tridimensional. Se observarmos microscopicamente um sólido encontrado na natureza, veremos que sua estrutura é basicamente formada por um arranjo espacial de elementos (átomos ou íons, por exemplo). Essa distribuição espacial é chamada de *rede* e os elementos formam a *base*. Em um *sólido cristalino* a base é uniforme e regularmente distribuída na rede, como pode ser visto na figura 1.3, que esquematiza uma rede plana retangular. Uma repetição

Figura 1.3: Em um sólido cristalino, os elementos da base estão distribuídos regularmente.



Fonte: Autor (2014).

infinita desse padrão forma a *rede de Bravais* [3], onde a posição de cada sítio (em rede de tridimensional) pode ser representada por:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.7)$$

onde n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros e \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são chamados de *vetores primitivos*. O vetor primitivo é a distância entre dois íons em uma direção.

Como todos os elementos da base de um cristal são iguais, então a energia de potencial em qualquer sítio tem sempre o mesmo valor. Dizemos então que o potencial é

periódico, tal que:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1.8)$$

Conseqüentemente, tomando essa característica ao resolvermos o modelo de elétrons livres, encontramos como solução uma função de onda plana onde vale a expressão:

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &= \psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} \end{aligned} \quad (1.9)$$

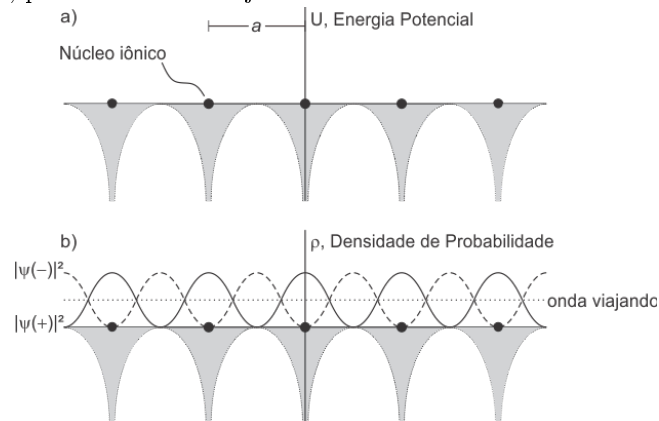
Portanto, ao considerarmos uma onda eletrônica se propagando na rede, ao encontrar uma barreira de potencial ela será parcialmente refletida e parcialmente transmitida. Quando uma segunda barreira é colocada, uma parte da onda fica refletindo na região entre as barreiras. Esse fenômeno é conhecido como *reflexões de de Bragg*. Como em um sólido cristalino todas as barreiras são iguais, as reflexões de Bragg faz com que a onda assumira uma forma estacionária. Logo, podemos representar a função de onda como um arranjo simétrico e antissimétrico, aqui obtida resolvendo o modelo do elétron livre para o caso unidimensional:

$$\psi(+)=\exp\left(\frac{i\pi x}{a}\right)+\exp\left(-\frac{i\pi x}{a}\right)=2\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (1.10)$$

$$\psi(-)=\exp\left(\frac{i\pi x}{a}\right)-\exp\left(-\frac{i\pi x}{a}\right)=2i\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (1.11)$$

sendo a uma constante com a periodicidade da rede e os sinais $+$ e $-$ representam a mudança de x por $-x$ quando a onda sofre uma reflexão. A figura 1.4 representa (a) o potencial da rede cristalina e (b) a distribuição da densidade de probabilidade ρ das funções de onda, mostrada nas equações 1.10 e 1.11, respectivamente.

Figura 1.4: Em (a), temos uma representação de um padrão típico de um potencial cristalino unidimensional. Os núcleos iônicos estão distribuídos regularmente, separados entre si por uma distância a . Em (b) temos a distribuição da densidade de probabilidade ρ na rede para $|\psi(+)|^2 \propto [\sin(\pi x/a)]^2$; $|\psi(-)|^2 \propto [\cos(\pi x/a)]^2$, para uma onda viajando.



Fonte: Kittel (1996) [2].

Baseado na fenomenologia apresentada até agora, Felix Bloch desenvolveu um modelo onde é possível obter os estados eletrônicos em redes cristalinas. Em seu modelo, o Hamiltoniano é escrito como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

onde $U(\mathbf{r})$ obedece a condição mostrada na equação 1.8. Portanto, a equação de Schrödinger independente do tempo é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_k(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r}) = E\psi_k(\mathbf{r}) \quad (1.13)$$

Logo, as soluções obtidas para $\psi_k(\mathbf{r})$ e $\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ obedecem a seguinte relação:

$$|\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})|^2 = |\psi_k(\mathbf{r})|^2 \quad (1.14)$$

Conseqüentemente, $\psi_k(\mathbf{r})$ e $\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ têm o mesmo auto-valor de energia E , diferenciado apenas por um fator de fase λ . Dessa forma, para uma rede formada por N íons, $\psi_k(\mathbf{r} + N\mathbf{R}) = \lambda^N\psi_k(\mathbf{r})$. Normalizando o fator de fase, $|\lambda|^2 = 1$, obtemos:

$$\begin{aligned} \lambda^N &= 1 \\ \lambda &= \exp\left(\frac{2\pi inr}{NR}\right) \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde n é um número inteiro entre 0 e $N - 1$. Então, a função de onda é expressa como:

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &= \exp\left(\frac{2\pi inr}{NR}\right) u(\mathbf{r}) \\ \psi_{n,k}(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})u_{n,k}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.16)$$

onde n é o *índice de banda*, relacionado a uma das soluções para a equação de Schrödinger. A partir dessa solução, apresentada pela equação 1.16, Bloch propõe seu teorema:

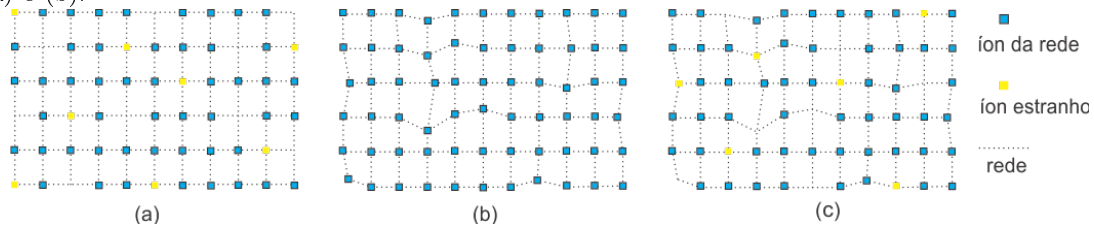
As autofunções da equação de onda para um potencial periódico são o produto de uma onda plana $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ vezes uma função $u_k(\mathbf{r})$, que apresenta a mesma periodicidade da rede cristalina.

Essa abordagem, proposta por Bloch, descreve a condução elétrica nos sólidos cristalinos e consegue prever com sucesso a ausência de resistência. Mas, na natureza, mesmo os sólidos cristalinos apresentam algum tipo de defeito. Esses defeitos são responsáveis por alterações na condução elétrica dos sólidos, fazendo com que alguns materiais se comportem como isolantes. Isso levou ao desenvolvimento de novos modelos onde essa característica tornou-se relevante para uma melhor compreensão do fenômeno de condução.

1.3 O Modelo de Anderson

Em um sólido perfeitamente cristalino, a função de onda consegue se espalhar por toda a rede. Nesse caso, dizemos que os auto-estados são *estendidos*, pois apresentam as mesmas características em qualquer ponto. Como consequência, a probabilidade de encontrar um elétron de condução é a mesma em toda a rede. Contudo, praticamente todos os sólidos, naturais ou artificiais, apresentam algum tipo de defeito, responsáveis por causar alterações na condução eletrônica. Essas falhas são conhecidas como *desordem* e são caracterizadas por irregularidades espaciais e/ou impurezas da base, como esquematizado na figura 1.5. Nas estruturas desordenadas os valores dos potenciais estão relacionados

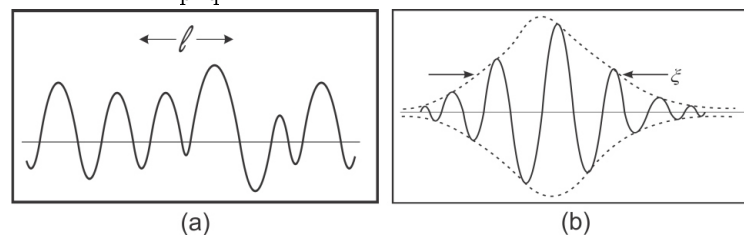
Figura 1.5: Defeitos encontrados na rede. Em (a) são encontrados íons estranhos ou alguns elementos estão ausentes. Em (b) a rede apresenta irregularidades espaciais. Em (c) é mostrada uma combinação de (a) e (b).



Fonte: Autor (2014).

ao grau de desordem. Assim, a presença de desordem acaba causando alterações nas reflexões sofridas pela onda entre as barreiras, resultando em interferências construtivas e destrutivas. Isso causa uma incoerência de fase que resulta na formação de um padrão específico da função de onda em uma região finita da rede. Esse fenômeno é conhecido como *localização da função de onda* [5, 6]. Nesse caso, os auto-estados se concentram em uma determinada região do sólido, sendo desprezíveis em qualquer outra. Dizemos então que os estados são *localizados*. A figura 1.6 mostra o padrão típico para funções de onda estendidas (1.6a) e funções de onda localizadas (1.6b). Assim, no trabalho de Lee e

Figura 1.6: No padrão (a), l representa o livre caminho médio, que é o comprimento de coerência. Quando a função é estendida, o elétron pode ser encontrado em qualquer região do material. Já no padrão (b) a função de onda é localizada, e nas regiões mais afastadas (extremos direito e esquerdo da imagem) seu valor torna-se muito pequeno.



Fonte: Lee e Ramakrishnan (1985) [7].

Ramakrishnan [7] é mostrado que a probabilidade de encontrar o elétron decai exponen-

cialmente com a distância, conforme a expressão 1.17 que mostra o caso unidimensional, onde ξ é o comprimento de localização.

$$\psi(x) \propto \exp\left(-\frac{x}{\xi}\right) \quad (1.17)$$

Nessa situação, o sistema se comporta como isolante. Os dois comportamentos descritos anteriormente nos leva a pensar na existência de uma transição estendido/localizado para um determinado grau de desordem intermediário. Na verdade, esta transição estendido/localizado é conhecida como *transição metal-isolante* e tem despertado grande interesse na comunidade científica desde o seu surgimento.

Embora o modelo de Bloch conseguisse explicar a condução nos sólidos perfeitamente cristalinos, ele falha por não prever o fenômeno de localização em sistemas que apresentam algum grau de desordem. Assim, no final da década de 1950 um novo modelo, proposto por Paul W. Anderson [8], estuda os sistemas desordenados, permitindo uma descrição dos estados localizados e da dinâmica desses sistemas através de saltos quânticos dos elétrons entre os sítios da rede. Em seu modelo, Anderson considera apenas um termo cinético e um termo potencial, cujo Hamiltoniano é, no formalismo de segunda quantização, escrito como:

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (1.18)$$

onde ϵ_i é a energia potencial no sítio i e t_{ij} é a energia cinética do elétron quando ele salta do sítio i para o sítio j , chamado de *amplitude de hopping*. Os coeficientes c_i^\dagger e c_i são os operadores de criação e aniquilação de um elétron no sítio i . Além disso, esse modelo considera que a desordem é distribuída aleatoriamente pela rede, de modo que ϵ_i assume valores aleatórios dentro do intervalo $\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$, sendo W a *largura de desordem*.

Para obter os auto-estados eletrônicos, primeiro é resolvida a equação de Schrödinger independente do tempo, que no caso unidimensional é:

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.19)$$

Expandindo os auto-estados nas bases dos orbitais atômicos, $\psi = \sum_n f_n \phi_n$, obtemos:

$$E \sum_n f_n \phi_n = \sum_n \bar{\epsilon}_n c_n^\dagger c_n f_n \phi_n + \sum_{n \neq j} t_{nj} c_n^\dagger c_j f_n \phi_n \quad (1.20)$$

Se considerarmos que o elétron apenas salta para o primeiro vizinho, então 1.20 é escrita como:

$$E f_n = \bar{\epsilon}_n f_n + t(f_{n-1} + f_{n+1}) \quad (1.21)$$

Usando as grandezas adimensionais:

$$\varepsilon = \frac{E}{t} \quad \text{e} \quad \epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{t} \quad (1.22)$$

reescrevemos 1.21 e obtemos a equação de recorrência:

$$\varepsilon f_n = \epsilon_n f_n + f_{n-1} + f_{n+1} \quad (1.23)$$

A partir das equações 1.18 e 1.23 podemos então representar o hamiltoniano do sistema na forma matricial, que para o caso unidimensional de uma rede com N sítios, é:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \epsilon_2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \epsilon_{N-2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \epsilon_{N-1} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \epsilon_N \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Logo, os auto-estados eletrônicos são obtidos diagonalizando a matriz encontrada. Além disso, para duas e três dimensões, o hamiltoniano apresenta matrizes um pouco diferentes.

Para obter informações da dinâmica do sistema, devemos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo. No caso unidimensional, temos:

$$\begin{aligned} H\psi &= i\hbar \frac{d}{dt} \psi \\ i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n f_n \phi_n &= \sum_n \bar{\epsilon}_n c_n^\dagger c_n f_n \phi_n + \sum_{n \neq j} t_{nj} c_n^\dagger c_j f_n \phi_n \\ i\hbar \frac{d}{dt} f_n &= \bar{\epsilon}_n f_n + t(f_{n-1} + f_{n+1}) \end{aligned} \quad (1.25)$$

Novamente usando a grandeza adimensional $\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{t}$ obtemos a equação de recorrência:

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_n = \epsilon_n f_n + f_{n-1} + f_{n+1} \quad (1.26)$$

Para o caso estendido, $\lim_{t \rightarrow \infty} f_n(t) = 0$, ou seja, a probabilidade de encontrar o elétron no sítio n é nula — a função de onda eletrônica se estende por toda a rede. Caso contrário, o elétron poderá ser encontrado apenas na vizinhança de n , caracterizando um estado localizado.

Nesse trabalho, Anderson demonstrou que a localização está relacionada à presença de desordem no sistema. Esse fenômeno é conhecido como *localização de Anderson* e ocorre em sistemas de baixa dimensionalidade ($d \leq 2$). Posteriormente foi descoberto que em sistemas desordenados com dimensão elevada ($d > 2$) pode existir estados estendidos. Isso sugere que, dependendo do grau de desordem, o sistema pode apresentar um comportamento conhecido como *transição metal-isolante*, ou *transição de Anderson*.

1.3.1 Teoria de escala do modelo de Anderson

A publicação de Anderson resultou em diversos estudos sobre a transição metal-isolante, proposta por ele. Um desses estudos foi realizado por David J. Thouless [9], que em 1974 propôs um parâmetro capaz de controlar a transição do estado estendido para o estado localizado em $T = 0$: a *condutância generalizada* (g). Para isso, Thouless reformulou o modelo de Anderson, descrevendo um sólido como um arranjo de várias caixas, de volume l^d e contendo vários sítios, ao invés de sítios distribuídos na rede. Com isso, ele define a condutância generalizada como:

$$\frac{1}{g} \approx \frac{\Delta E}{\delta E} \quad (1.27)$$

onde ΔE representa o espaçamento médio entre os níveis e δE é o deslocamento causado por mudanças nas condições de contorno, correspondendo às energias W e t , respectivamente, do modelo de Anderson.

Pelo princípio de incerteza, se estabelece que:

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D} \quad (1.28)$$

Onde t_D é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônica difundir até os contornos da caixa de lado L . Se elétron realiza movimento Browniano dentro da caixa, então:

$$t_D = \frac{L^2}{D} \quad (1.29)$$

onde D é a constante de difusão. A partir da relação de Einstein entre condutividade e propriedades de difusão, temos:

$$\sigma = e^2 D n(E) \quad (1.30)$$

Onde σ é a condutividade e $n(E)$ é a densidade média de estados. Logo, combinando a equação 1.30 com as equações 1.29 e 1.28 obtemos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))} \quad (1.31)$$

Podemos escrever a densidade média de estados como função do espaçamento médio entre os níveis. Logo:

$$n(E) = \frac{1}{(L^d \Delta E)} \quad (1.32)$$

Na teoria de escala, a condutância mede a força da desordem, de forma análoga a W/B no Modelo de Anderson. Com isso, estados estendidos são sensíveis à mudança na condição de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados localizados não são sensíveis à mesma mudança ($\delta E < \Delta E$). Substituindo as equações 1.31 e 1.32 na equação 1.27, obtemos o comportamento de escala do parâmetro g :

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} \quad (1.33)$$

Considerando g_0 como a condutância generalizada para um sistema composto por caixas acopladas, de volume L_0^d , temos:

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)} \quad (1.34)$$

Assim, podemos obter a condutância para uma escala maior, $L = L_0 b$, onde b é o fator de escala. Se b for tratado como uma transformação contínua, o comportamento de escala de g pode ser determinado por:

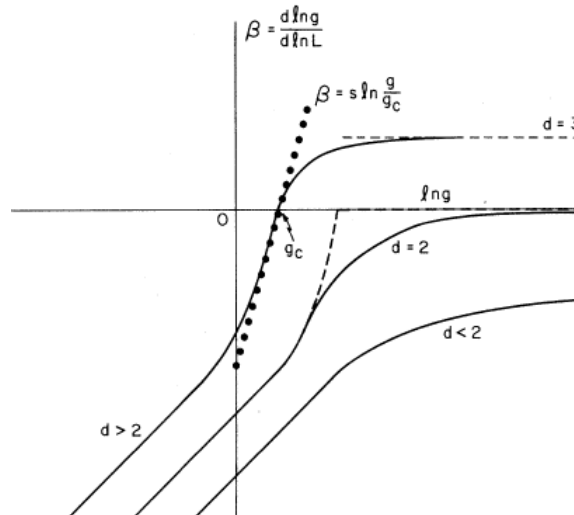
$$\begin{aligned} \ln g(L) &= \ln \left(\frac{\hbar}{e^2} \sigma \right) + (d-2) \ln(L) \\ \beta(g) &= \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \end{aligned} \quad (1.35)$$

Portanto, da equação 1.35, temos que $\lim_{L \rightarrow \infty} \beta(g) = d-2$. A partir disso, podemos concluir que:

- $\beta > 0$: g cresce com o aumento de L , caracterizando um comportamento metálico.
- $\beta \leq 0$: g diminui com o aumento de L , caracterizando um comportamento isolante.

A figura 1.7 mostra o comportamento de $\beta(g)$ para os casos em que $d = 1, 2$ e 3 . Existe

Figura 1.7: Comportamento qualitativo da condutância generalizada $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala.



Fonte: Abrahams (1979) [10].

um ponto crítico no diagrama e fluxo, g_c , chamado de *ponto fixo instável*, quando $\beta = 0$. Observando a figura 1.7, vemos que há uma dependência da Transição de Anderson com a dimensão: apenas para $d = 3$ existe a transição metal-isolante.

1.4 Dois Elétrons Interagentes em Redes Unidimensionais

O modelo proposto por Anderson no final da década de 50 consegue prever o comportamento isolante para sólidos desordenados. Contudo, ele, assim como Bloch, despreza a interação entre os elétrons da rede e, com isso, não foi capaz de explicar a condução elétrica em certos tipos de materiais. Assim, em 1949, Nevill F. Mott [11] publicou um trabalho onde ele discute o problema do óxido de níquel. Nesse trabalho, Mott mostra que o óxido de níquel apresenta uma estrutura cúbica e, embora ele seja isolante no estado puro, apresenta também um comportamento condutor, de acordo com os modelos anteriores, necessitando de mais investigação. Posteriormente, em 1968, Mott [12] descreve uma transição metal/isolante, conhecida como *transição de Mott*, considerando os efeitos da interação Coulombiana entre os elétrons da rede.

Na transição de Mott, quando um elétron itinerante se desloca pela rede, ao chegar em determinado sítio poderá encontrá-lo já ocupado por outro elétron. Nesse caso, irá ocorrer uma repulsão tipo Coulombiana entre os elétrons, cuja energia dessa interação é:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{12}} \right) \quad (1.36)$$

onde ϵ_0 é a permissividade elétrica no vácuo e r_{12} é a distância entre os dois elétrons. Assim, se o custo energético desta dupla ocupação for grande o suficiente para inibir a propagação do elétron, o sistema apresenta um comportamento isolante.

Para compreender como os dois elétrons podem ocupar o mesmo sítio, devemos analisar este fenômeno sob o ponto de vista da Mecânica Quântica. Como sabemos, os elétrons tem natureza dual, se comportando como ondas e como partículas. Além disso, como os elétrons são férmions, eles não podem ocupar o mesmo estado quântico e, com isso, suas autofunções são totalmente antissimétricas sobre a troca de quaisquer duas partículas [13], ou seja, temos o *Postulado de Simetrização*:

$$P_{ij} |\text{N férmions idênticos}\rangle = - |\text{N férmions idênticos}\rangle \quad (1.37)$$

sendo P_{ij} o operador de permutação que troca a i -ésima pela j -ésima partícula, para qualquer i e j . Logo, com essa abordagem podemos tratar a interação entre dois elétrons de um sistema através da função de onda que, na ausência de acoplamento entre o spin e a posição dos elétrons, podemos expressá-la como:

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\chi(m_{s1}, m_{s2}) \quad (1.38)$$

onde ϕ contém as coordenadas de posição e χ contém as coordenadas de spin.

Se os elétrons forem distinguíveis por spin, como nos trabalhos de Brito [14] e Römer [15], podemos reescrever a parte espacial da função de onda, de modo que a

probabilidade de encontrar o elétron 1 em d^3x_1 em torno de \mathbf{x}_1 e o elétron 2 em d^3x_2 em torno de \mathbf{x}_2 , independente do spin, é:

$$|\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 = |\omega_A(x_1)|^2 |\omega_B(x_2)|^2 \quad (1.39)$$

Portanto, para uma rede de N sítios, o sub-espço gerado por todos os estados de posição dos dois elétrons será expandido em N^2 funções de onda, que no formalismo de segunda quantização é expressa por:

$$|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1,\uparrow}} \sum_{n_{2,\downarrow}} f_{n_{1,\uparrow}, n_{2,\downarrow}} c_{n_{1,\uparrow}}^\dagger c_{n_{2,\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle \quad (1.40)$$

onde $|0, 0\rangle$ é o estado de vácuo, em que o número de ocupação dos estados de um elétron é zero. Os números de *spin up* e *spin down* são representados por \uparrow e \downarrow e os sítios ocupados pelos elétrons 1 e 2 são, respectivamente, n_1 e n_2 .

Com base nesses conceitos, John Hubbard [16] propôs um modelo onde a interação entre os elétrons é levada em conta. Dessa forma, ele descreve o hamiltoniano do sistema em termos da energia cinética dos elétrons e da interação coulombiana U entre eles, sendo expresso no formalismo de segunda quantização por:

$$H = -t \sum_{i,j} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \right) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1.41)$$

A maioria dos modelos abordados despreza os efeitos da interação entre os elétrons da rede. Contudo, em um sólido, vários elétrons se movem na rede durante a condução. Com isso, é natural que possa haver alguma interação entre esses elétrons. Dentro deste contexto, um modelo baseado em apenas duas partículas interagentes tem sido muito explorado por apresentar aspectos físicos relevantes que auxiliam o entendimento das propriedades de sistemas com partículas interagentes de densidade finita. Essa nova abordagem resultou na formulação de vários trabalhos, sendo Dima L. Shepelyansky [17] um dos primeiros a considerar o problema de dois elétrons interagentes em uma cadeia unidimensional.

1.4.1 O modelo de Anderson-Hubbard em redes unidimensionais com desordem

Conforme discutido na seção 1.3, dependendo do grau de desordem em sistemas de alta dimensionalidade ($d > 2$), pode ocorrer uma mudança de comportamento (condutor/isolante) na condução do sistema, conhecida como transição de Anderson. Contudo, Mott propôs que a interação entre os elétrons da rede também pode promover um tipo de transição metal-isolante, conhecida como transição de Mott. Diante desses conceitos, para estudar um sistema que leva em conta essas características podemos combinar os modelos

de Anderson e de Hubbard, obtendo o bem conhecido modelo de Anderson-Hubbard. Assim, podemos escrever o Hamiltoniano de Anderson-Hubbard, no formalismo de segunda quantização, como:

$$H = J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} \quad (1.42)$$

onde $c_{n,\sigma}^{\dagger}$ e $c_{n,\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de férmions, respectivamente, para um elétron num sítio n com spin $\sigma = \pm 1/2$, os parâmetros \bar{U} e J são, respectivamente, a interação Coulombiana entre dois elétrons e o termo de hopping. Para um potencial cristalino, “tipo Bloch”, as energias $\bar{\epsilon}_n$ seriam todas iguais. Para um potencial totalmente desordenado, “tipo Anderson”, as energias $\bar{\epsilon}_n$ seriam valores distribuídos aleatoriamente dentro da largura da desordem.

Considerando dois interagentes e elétrons distinguíveis por número de spin, como nas referências [14, 15], podemos obter os auto-estados do sistema resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$H |\Psi(n_1, n_2)\rangle = E |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (1.43)$$

Aplicando o Hamiltoniano 1.42, obtemos:

$$\begin{aligned} H |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) |\Psi(n_1, n_2)\rangle}_{H_1} \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} |\Psi(n_1, n_2)\rangle}_{H_2} \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{U} c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} |\Psi(n_1, n_2)\rangle}_{H_3} \end{aligned} \quad (1.44)$$

Impondo algumas condições nas posições dos dois elétrons (n_1 e n_2), podemos encontrar uma relação de recorrência para obter os auto-estados, como veremos a seguir.

Para $n_2 = n_1$:

- Para H_1 :

$$\begin{aligned} H_1 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle) \end{aligned} \quad (1.45)$$

- Para H_2 :

$$H_2 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} 2\bar{\epsilon}_{n_1} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \quad (1.46)$$

- Para H_3 :

$$H_3 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \bar{U} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \quad (1.47)$$

Portanto, a partir das equações 1.45, 1.46 e 1.47, obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\begin{aligned} E |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [J(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle) + (2\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{U}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle] \end{aligned} \quad (1.48)$$

Tomando agora $n_2 = n_1 + 1$, temos:

- Para H_1 :

$$\begin{aligned} H_1 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle) \end{aligned} \quad (1.49)$$

- Para H_2 :

$$H_2 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \quad (1.50)$$

Como H_3 possui um termo de interação de Hubbard, ele só existe para elétrons no mesmo sítio (como no caso anterior). Com isso, a equação de Schrödinger para $n_2 = n_1 + 1$ independe de H_3 . Logo, com as equações 1.49 e 1.50 obtemos:

$$\begin{aligned} E |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [J(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle) + (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle] \end{aligned} \quad (1.51)$$

Agora, tomando $n_2 = n_1 + 2$, obtemos:

- Para H_1 :

$$\begin{aligned} H_1 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle) \end{aligned} \quad (1.52)$$

- Para H_2 :

$$H_2 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+2}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \quad (1.53)$$

Como no caso anterior, a equação de Schrödinger independe de H_3 , visto que os elétrons não ocupam o mesmo sítio. Então, com as equações 1.52 e 1.53 obtemos:

$$\begin{aligned}
E |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [J(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \\
&+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle) \\
&+ (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle]
\end{aligned} \tag{1.54}$$

Considerando somente os termos não-nulos e acrescentando as grandezas adimensionais

$$\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{J}, \quad U = \frac{\bar{U}}{J} \quad \text{e} \quad \varepsilon = \frac{E}{J} \tag{1.55}$$

nas equações 1.48, 1.51 e 1.54, obtemos as equações:

- Para $n_2 = n_1$:

$$\varepsilon f_{n_1, n_1} = f_{n_1+1, n_1} + f_{n_1, n_1+1} + f_{n_1-1, n_1} + f_{n_1, n_1-1} + (2\epsilon_{n_1} + U) f_{n_1, n_1} \tag{1.56}$$

- Para $n_2 = n_1 + 1$:

$$\varepsilon f_{n_1, n_1+1} = f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + f_{n_1-1, n_1+1} + f_{n_1, n_1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1}) f_{n_1, n_1+1} \tag{1.57}$$

- Para $n_2 = n_1 + 2$:

$$\varepsilon f_{n_1, n_1+2} = f_{n_1+1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+3} + f_{n_1-1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2}) f_{n_1, n_1+2} \tag{1.58}$$

Comparando as equações 1.56, 1.57 e 1.58, finalmente obtemos a equação de recorrência

$$\varepsilon f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2} \tag{1.59}$$

Assim, com as equações 1.42 e 1.59, podemos escrever o hamiltoniano na forma matricial, obtendo um espaço de Hilbert expandido de ordem N^2 . Portanto, considerando no caso unidimensional uma rede com, por exemplo, 3 sítios a matriz é:

$$H = \begin{array}{c|ccccccccc|}
N = 3 & |1, 1\rangle & |1, 2\rangle & |1, 3\rangle & |2, 1\rangle & |2, 2\rangle & |2, 3\rangle & |3, 1\rangle & |3, 2\rangle & |3, 3\rangle \\
\hline
\langle 1, 1| & 2\epsilon_1 + U & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\langle 1, 2| & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\langle 1, 3| & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
\langle 2, 1| & 1 & 0 & 0 & \epsilon_2 + \epsilon_1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
\langle 2, 2| & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_2 + U & 1 & 0 & 1 & 0 \\
\langle 2, 3| & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_2 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 \\
\langle 3, 1| & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 & 1 & 0 \\
\langle 3, 2| & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_3 + \epsilon_2 & 1 \\
\langle 3, 3| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_3 + U
\end{array} \tag{1.60}$$

Redes de duas ou três dimensões apresentam matrizes um pouco diferentes. Para obter informações dos auto-estados do sistema, devemos diagonalizar a matriz utilizando a equação secular:

$$\det(H - \lambda I) = 0 \tag{1.61}$$

Isso pode ser feito utilizando rotinas numéricas apropriadas, como a biblioteca LAPACK [18] de rotinas de álgebra linear, utilizadas em nosso estudo.

Para analisar os aspectos dinâmicos do sistema, resolvemos a equação de Shrödinger dependente do tempo. Assim, temos:

$$H |\Psi(n_1, n_2)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (1.62)$$

De forma similar ao caso estacionário, aplicamos o Hamiltoniano de Anderson-Hubbard à equação 1.62, obtendo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right)}_{H_4} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma}}_{H_5} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow}}_{H_6} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \end{aligned} \quad (1.63)$$

Impondo as mesmas condições nas posições dos elétrons 1 e 2 (respectivamente n_1 e n_2) como no caso estacionário, obtivemos a equação de recorrência:

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U \delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2} \quad (1.64)$$

Com a equação 1.64 podemos obter a evolução temporal do pacote de onda. Para isso, podemos implementar um método numérico, como o método de Runge-Kutta.

1.5 Aperiodicidade na Distribuição de Potenciais

A energia potencial da interação elétron-íon é um elemento importante no estudo da condução eletrônica nos sólidos, estando presente em boa parte dos modelos discutidos neste capítulo. Para Bloch, como mostrado na seção 1.2, em um sólido cristalino todos os íons são iguais e estão regularmente distribuídos (*distribuição periódica*). Com isso, os potenciais $U(\mathbf{r})$ tem sempre o mesmo valor, em qualquer ponto da rede, como mostrado na equação:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1.65)$$

Já para Anderson, a presença de desordem do material faz com que esses potenciais assumam um valor aleatório dentro de um intervalo (a largura de desordem), como discutido na seção 1.3. Como consequência, os estados eletrônicos passam a se concentrar em uma determinada região da rede.

A distribuição da energia potencial é responsável por fenômenos interessantes relacionados aos auto-estados eletrônicos, caracterizando um comportamento metálico ou isolante de certos materiais. Isso resultou na formulação de diversos trabalhos que investigam os efeitos da distribuição sobre o comportamento dos materiais. Foi demonstrado que a presença de aperiodicidade e correlação na distribuição da desordem pode causar uma violação na teoria de escala, apresentada na seção 1.3.1, conforme será melhor discutido no próximo capítulo. Além disso, Mott propõe que a interação entre os elétrons da rede também contribui para a transição metal-isolante, motivando diversos estudos que investigam o fenômeno de condução nos sólidos considerando essa característica.

Contudo, em sistemas de várias partículas não é tão simples resolver os modelos e obter as informações a respeito dos auto-estados eletrônicos. Um modelo mais simples, e que tem obtido bons resultados, é o sistema formado por dois elétrons interagentes. Um dos pioneiros a investigar sistemas desse tipo foi Shepelyansky [17], onde ele investiga as propriedades desse sistema em uma rede unidimensional. Esse modelo tem sido de grande importância para o estudo dos fenômenos de transporte eletrônico, resultando em diversas publicações.

Nesse trabalho iremos investigar algumas propriedades do modelo de dois elétrons interagentes em redes unidimensionais. Em nosso modelo a rede não é perfeitamente cristalina. Com isso, as energias da interação elétron-íon são distribuídas de forma aperiódica, regidas por uma equação determinística. Em um primeiro momento será discutido como se dá a distribuição das energias. Em seguida, serão investigadas propriedades estacionárias e dinâmicas dos estados eletrônicos, onde serão discutidos os resultados de nosso estudo.

2

DOIS ELÉTRONS INTERAGENTES EM UMA REDE APERIÓDICA UNIDIMENSIONAL

No capítulo anterior foram apresentados alguns modelos que tentam explicar a condução nos sólidos. Conforme discutido anteriormente, a maioria dos sólidos apresenta algum tipo de desordem ou aperiodicidade. Devido presença de desordem ocorrem múltiplas reflexões da função de onda que interferem entre si, causando a chamada localização de Anderson. A localização de Anderson reduz a mobilidade eletrônica, levando o sistema a um estado isolante. Em sistemas com dimensão alta ($d > 2$) e grau de desordem fraco, o sistema pode apresentar estados estendidos e, portanto, um comportamento metálico. Para desordem forte, mesmo em dimensão alta, os estados são localizados e o sistema não conduz. A transição entre estados estendido e localizado induzida pela intensidade da desordem é conhecida como transição metal/isolante. Nos últimos vinte anos foi descoberto que o tipo de distribuição de desordem utilizado pode influenciar no comportamento do sistema, principalmente em dimensão baixa. Diversos autores demonstraram que a presença de correlações na distribuição de desordem pode modificar totalmente o comportamento isolante predominante em $d = 1$. A seguir, discutiremos os efeitos das distribuições aperiódicas de potenciais sobre a natureza dos estados eletrônicos. Vamos discutir resumidamente o efeito destas correlações e em seguida vamos apresentar nossos resultados, que consistem em investigar a competição entre distribuições aperiódicas, interação elétron-elétron e campos elétricos.

2.1 Potenciais Aperiódicos: Efeitos de Correlação

Como visto na seção 1.3.1, foi proposta uma teoria de escala onde foi demonstrado que em sistemas de alta dimensionalidade ($d > 2$) deve existir uma transição

metal/isolante. Assim, a partir de 1970 diversos trabalhos foram produzidos tentando explicar esse fenômeno de transição nos sólidos. Esses trabalhos investigaram a influência da distribuição de desordem e verificaram que a presença de correlação causa um comportamento intermediário entre o caso periódico e o caso aleatório, não previsto pelo modelo de Anderson unidimensional.

Em 1980, J.B. Sokoloff [19], baseado no trabalho de M.Ya. Azbel [20], estudou a localização eletrônica no modelo *tight binding*, cuja equação de Schrödinger é:

$$f_{n+1} + f_{n-1} + V_0(\cos \pi qn)f_n = Ef_n \quad (2.1)$$

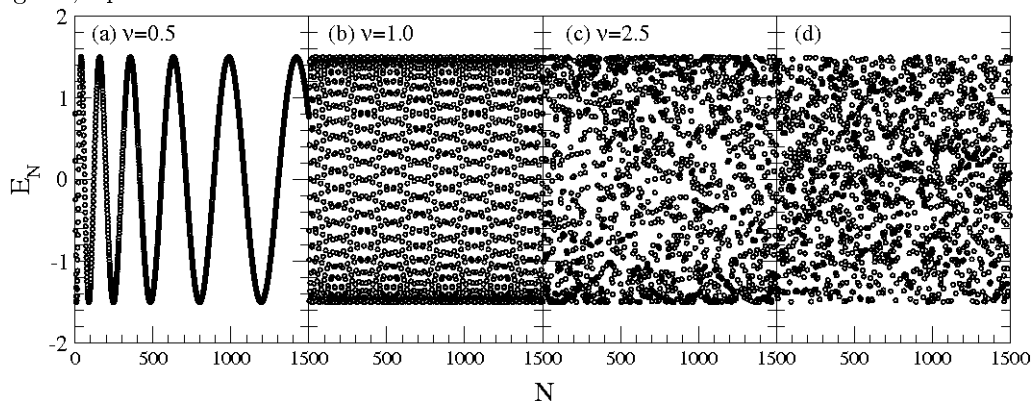
onde f_n é o coeficiente de expansão para a função $\psi(x) = \sum_n f_n \phi(x - na)$ e ϕ representa o orbital atômico. Nesse trabalho Sokoloff considera um potencial de valor incomensurável. Para isso, a carga é um múltiplo irracional de π . Ele mostrou algumas diferenças entre os resultados obtidos para valores comensuráveis e incomensuráveis de q , além de que, dependendo do valor de V_0 , existe uma transição de estados estendidos/localizados em sistemas unidimensionais.

Posteriormente, Griniasty e Fishman [21] investigaram o comprimento de localização no modelo tight-binding $\epsilon_n u_n + u_{n+1} + u_{n-1} = E u_n$, onde a energia ϵ_n é definida por:

$$\epsilon_n = V \cos(\pi \alpha |n|^\nu) \quad (2.2)$$

Através de métodos numéricos e teoria da perturbação, eles encontraram que o grau de localização aumenta com o aumento de ν , se assemelhando ao caso aleatório. Contudo, no intervalo $1 < \nu < 2$ houve uma discrepância entre os resultados obtidos numericamente e obtidos por teoria de perturbação. Assim, os autores sugerem mais investigação. A figura 2.1 ilustra algumas distribuições de potenciais para diferentes valores de ν .

Figura 2.1: Distribuição de potenciais para (a) $\nu = 0.5$, (b) $\nu = 1.0$ e (c) $\nu = 2.5$, usando a equação 2.2, e (d) no caso aleatório. Em todos os casos a amplitude de potencial é $V = 1.5$. Nos casos (a) e (b) observa-se um arranjo organizado, característico do estado metálico. Nos casos (c) e (d) a distribuição é bem irregular, típico de um material isolante.



Fonte: Autor (2014).

No final da década de 1980, Thouless [22] investigou a localização em um modelo unidimensional para 1 elétron, retomando o problema proposto por Griniasty e Fishman. Nesse trabalho, ele encontrou que o comprimento de localização aumenta a medida em que se aproxima do centro da banda, de modo que os resultados não podem ser obtidos diretamente através da teoria de perturbação. Com base nisso, Sarma *et al* [23, 24] aplica o modelo tight-binding unidimensional, onde é encontrada uma dependência do grau de localização com a amplitude de potencial V e os valores de ν . Os resultados obtidos apresentaram o seguinte:

- Para $0 < \nu < 1$ e $V < 2$:

Os estados são estendidos na faixa $-2 + V < E < 2 - V$.

Os estados são localizados nas faixas $2 - V < E < 2 + V$ e $-2 - V < E < -2 + V$.

- Para $0 < \nu < 1$ e $V > 2$:

Todos os estados são localizados.

- Para $\nu = 1$ e $V < 2$:

Todos os estados são estendidos.

- Para $\nu = 1$ e $V > 2$:

Todos os estados são localizados.

- Para $1 < \nu < 2$:

Todos os estados são localizados, mas o expoente de Lyapunov se aproxima de zero, lentamente, no centro da banda ($E = 0$).

- Para $\nu \geq 2$:

Todos os estados são exponencialmente localizados: o sistema se comporta como no modelo de Anderson unidimensional.

A presença de correlação na distribuição da desordem também é responsável por comportamentos não previstos no modelo de Anderson unidimensional. No trabalho de Moura e Lyra [25], uma correlação de longo alcance é introduzida nos elementos da diagonal do hamiltoniano de Anderson, representando uma desordem nos sítios da cadeia. Eles conseguiram mostrar uma fase de estados estendidos no centro da banda, ou seja, existe uma transição metal-isolante em sistemas desordenados unidimensionais.

A seguir serão apresentados os resultados e discussões de nosso trabalho, onde investigamos os auto-estados estacionários e a dinâmica do sistema. Em nosso modelo, consideramos dois elétrons interagentes, indistinguíveis, itinerantes em uma rede unidimensional, cuja distribuição de energias é aperiódica e regida pela equação 2.2. Também foi estudado os aspectos dinâmicos de nosso sistema ao aplicarmos um campo eletrostático externo, paralelo à rede.

2.2 Resultados: Aspectos Estacionários

Inicialmente investigamos os aspectos estacionários do sistema. Para obter as propriedades de interesse, primeiro resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo, afim de obter os auto-estados do sistema, conforme mostrado na seção 1.4.1. Impondo algumas condições nas posições dos dois elétrons encontramos a equação de recorrência:

$$\varepsilon f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1, n_2})f_{n_1, n_2} \quad (2.3)$$

Assim, escrevemos o Hamiltoniano na forma matricial e aplicamos a técnica de diagonalização direta, utilizando as rotinas LAPACK [18], para obter os auto-valores e auto-vetores do sistema.

O primeiro aspecto investigado em nosso sistema foi a função participação, onde pudemos analisar melhor a transição metal-isolante governada pelo parâmetro ν (ver equação 2.2). A função participação nos dá uma ideia de quantos sítios da rede estão participando efetivamente da condução e apresenta uma melhor medida do grau de localização. A função participação é definida por:

$$P(E) = \frac{1}{\sum_{n_1, n_2} |f_{n_1, n_2}(E)|^4} \quad (2.4)$$

Além disso, para uma melhor visualização dos resultados, aplicamos na diagonalização a restrição $|E| < 0.5$, considerando apenas os estados próximos ao centro da banda. Também normalizamos os resultados fazendo o cálculo da participação média:

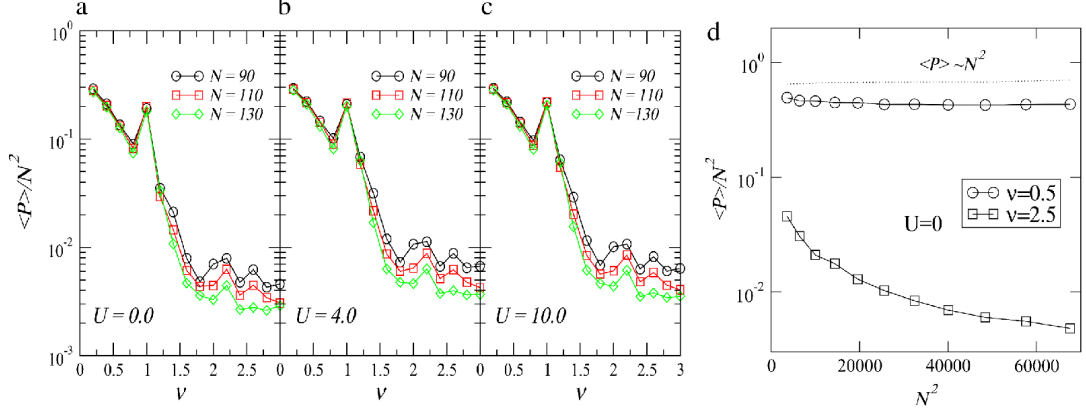
$$\frac{\langle P \rangle}{N^2} = \frac{\sum_{|E| < 0.5} P(E)}{N_E N^2} \quad (2.5)$$

onde N_E é o número de auto-estados no intervalo $|E| < 0.5$. A figura 2.2 mostra os resultados obtidos para redes de 90, 110 e 130 sítios, $U = 0.0, 4.0, 10.0$ e diversos valores de ν . Além disso, tomamos $V = 1.5$ e $\pi\alpha = 1.0$.

Nos resultados mostrados em 2.2a, 2.2b e 2.2c podemos ver que para $\nu \leq 1$ a participação é proporcional a N^2 , caracterizando um comportamento metálico. Além disso, claramente temos que esse comportamento independe do tamanho da cadeia ou da presença de interação. Contudo, com o aumento do grau de desordem ($\nu > 1$), pode-se ver que $\langle P \rangle / N^2$ começa a depender do tamanho da cadeia, assumindo um comportamento de isolante. Também é mostrado que a presença de interação causa um enfraquecimento da localização de Anderson (ver figuras 2.2b e 2.2c).

Na figura 2.2d nos mostra uma comparação dos resultados de $\langle P \rangle / N^2$ versus N^2 , sem interação, obtidos para $\nu = 0.5$ e $\nu = 2.5$. Nessa imagem é mostrado mais claramente que em regimes estendidos a participação é, de fato, proporcional a N^2 , enquanto que no

Figura 2.2: Participação média para diversos valores de ν , dentro da restrição $|E| < 0.5$, calculada em redes de $N = 90, 110, 130$ sítios. Além disso, a figura mostra os resultados para as interações (a) $U = 0.0$, (b) $U = 4.0$ e (c) $U = 10.0$. Em (d) temos o gráfico obtido para $\langle P \rangle / N^2$ versus N^2 .

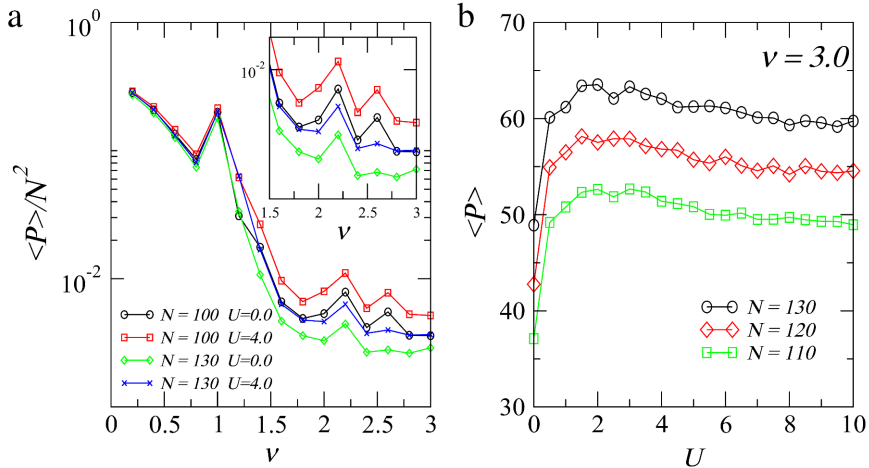


Fonte: Peixoto *et al* (2014) [26].

regime localizado a participação decai exponencialmente com N^2 . Estes resultados estão de acordo com a literatura ([21, 22, 23, 24]).

Para compreender melhor a influência da interação no enfraquecimento da localização, também investigamos a participação média $\langle P \rangle$ para diversos valores de U . A figura 2.3 apresenta os resultados obtidos para redes de 100 e 130 sítios. Na figura 2.3a nova-

Figura 2.3: Em (a) temos $\langle P \rangle / N$ versus ν , para $N = 100, 130$, $U = 0.0$ e $U = 4.0$. Podemos observar que houve um enfraquecimento da localização devido a interação entre os elétrons. Já em (b) temos $\langle P \rangle$ versus U , onde é mostrado que valores intermediários de interação promove uma maior diminuição no grau de localização.



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [26].

mente ocorre o colapso dos dados para $\nu \leq 1$, caracterizando o comportamento metálico; para $\nu > 1$, o sistema é dominado por estados localizados (comportamento isolante). O detalhe nos mostra que a participação é menor em redes maiores no regime localizado, corroborando os resultados mostrados anteriormente. Na figura 2.3b temos $\langle P \rangle$ versus U ,

onde podemos ver que a participação aumenta rapidamente até que U atinja um valor intermediário. À medida que U aumenta, a participação começa a diminuir lentamente. Independente do tamanho da cadeia esse comportamento é observado. Concluimos que isso ocorre porque uma interação intermediária promove um movimento coerente dos elétrons, causando uma diminuição na localização de Anderson. Quando mais forte fica a interação, maior fica o custo energético para manter os dois elétrons próximos, tornando os movimentos dos elétrons menos coerentes. Dessa forma o sistema se comporta como no caso de um único elétron e o grau de localização volta a crescer.

2.3 Resultados: Aspectos Dinâmicos

Além dos aspectos estacionários do sistema, investigamos também o caráter dinâmico do pacote de onda de dois elétrons. Neste caso, resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo, obtendo a equação de recorrência:

$$i\frac{d}{dt}f_{n_1,n_2} = f_{n_1+1,n_2} + f_{n_1,n_2+1} + f_{n_1-1,n_2} + f_{n_1,n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1,n_2})f_{n_1,n_2} \quad (2.6)$$

como mostrado na seção 1.4.1. Os cálculos das amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado pode ser obtido através do algoritmo de Runge-Kutta. Entretanto, em nossos cálculos nós empregamos um método numérico baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal:

$$A(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!} \quad (2.7)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema. A função de onda num tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = A(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$, de maneira que usamos o método recursivamente para obter a função de onda no tempo t . Os valores para a ordem de truncamento ($n_0 = 22$) e incremento de tempo ($\Delta t = 0.05$) foram comprovados suficientes para conservar a norma da função de onda em todo o intervalo de tempo requisitado. Como condição inicial, consideramos que os pacotes de onda são gaussianos, dados por:

$$\langle n_1s_1, n_2s_2 | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{\beta(\sigma)} \exp\left[\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2}\right] \exp\left[\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2}\right] \quad (2.8)$$

onde $\beta(\sigma)$ é uma constante de normalização e σ é a largura do pacote de onda. Consideramos que os pacotes de onda de largura $\sigma = 1.0$ estão inicialmente dispostos nos sítios $N/2 - d_0$ e $N/2 + d_0$.

Inicialmente, calculamos a extensão espacial $\xi(t)$ do pacote de onda eletrônico, definido por:

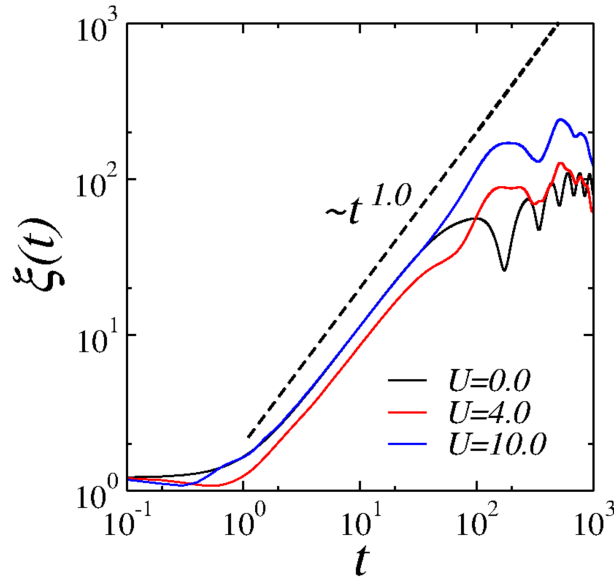
$$\xi(t) = \sum_{n_1, n_2} \sqrt{(n_1 - \langle n_1(t) \rangle)^2 + (n_2 - \langle n_2(t) \rangle)^2} |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad (2.9)$$

sendo

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} (n_i) |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad \text{com } i = 1, 2 \quad (2.10)$$

a posição média dos elétrons. Além disto, os parâmetros dos sistemas estudados foram $N = 1800$, $V = 1.5$, $\pi\alpha = 1.0$, $\nu = 0.5$, sendo as posições iniciais dos elétrons 1 e 2 $n_1^0 = n_2^0 = 882$, onde nós investigamos na presença da interação $U = 4.0, 10.0$ tomando como referência o sistema sem interação $U = 0.0$. No resultado apresentado é mostrado

Figura 2.4: Gráfico da extensão espacial versus tempo para uma cadeia de $N = 1800$ sítios, $U = 0, 4, 10$, $\sigma = 1$, $\nu = 0.5$, com os elétrons inicialmente na mesma posição ($d_0 = 0$). A imagem nos mostra uma evolução balística dos pacotes de onda, independente da interação, caracterizando o comportamento metálico do sistema.



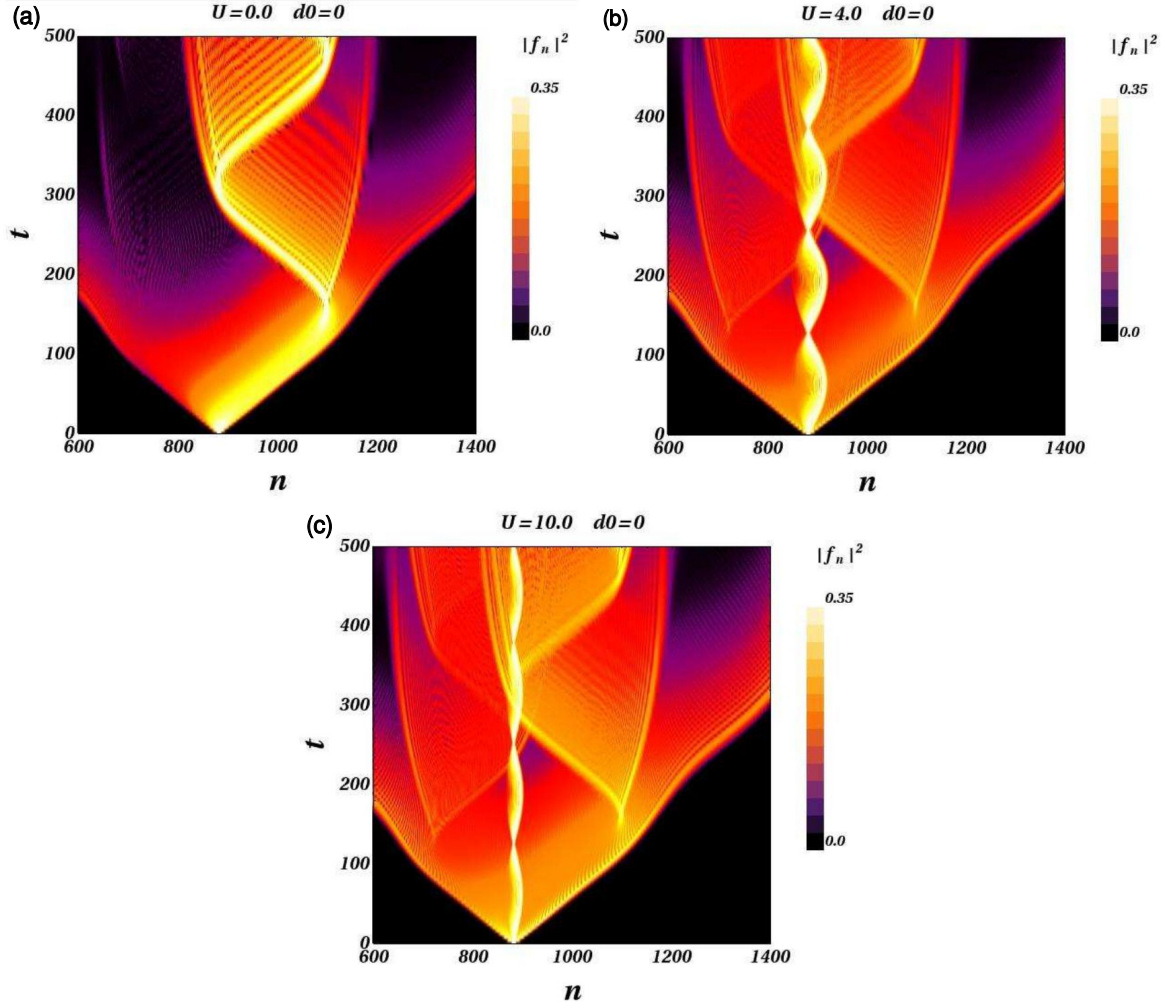
Fonte: Peixoto *et al* (2014) [26].

uma evolução balística do pacote de onda, independente da presença de interação. Isso nos mostra que a função de onda se estende por toda a rede, caracterizando o comportamento metálico do sistema para um fraco grau de desordem ($\nu = 0.5$). Esses resultados corroboram os resultados mostrados na seção 2.2.

Além disso, também estudamos a evolução temporal do pacote de onda. Para isso, foi calculado o centroide, definido pela posição média (ver equação 2.10). A figura 2.5 mostra o centroide de uma partícula em uma rede de 2000 sítios, com $\nu = 0.5$, $U = 0, 4, 10$. Na figura 2.5a ($U = 0.0$) podemos ver que o centroide apresenta um comportamento oscilatório, oscilando em torno de sua posição inicial enquanto o pacote de onda se alarga pela rede. Esse comportamento é causado pela distribuição aperiódica do potencial. Contudo, nota-se que na presença de interação a amplitude de oscilação diminui (ver figuras 2.5b e 2.5c), resultando em um maior aprisionamento do pacote de onda.

O comportamento oscilatório das partículas, mostrado na figura 2.5, é similar às já bem conhecidas oscilações de Bloch [2], onde os elétrons oscilam quando um campo

Figura 2.5: Centroide de uma partícula em uma rede de $N = 2000$ sítios, com $V = 1.5$, $\nu = 0.5$, $\pi\alpha = 1.0$, $\sigma = 1.0$ e $n_1^0 = n_2^0 = 882$. Em (a) não há interação ($U = 0.0$); em (b), temos uma interação intermediária ($U = 4.0$); em (c) a interação é forte ($U = 10.0$). Podemos ver nas figuras que o centroide tem comportamento oscilatório.



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [26].

eletrostático uniforme é aplicado paralelamente à rede. Os resultados apresentados anteriormente, sugerem que a existência de um campo elétrico local, proveniente do potencial dos sítios, são responsáveis por esse comportamento. Dessa forma, para entender melhor esse fenômeno, aplicamos um campo elétrico em nosso modelo, conforme será discutido na próxima seção.

2.3.1 Oscilações de Bloch: efeitos do campo local

A presença de campos elétricos e magnéticos atuando sobre redes tem despertado interesse dos físicos, resultando na publicação de vários trabalhos, como [27, 28]. Quando um campo elétrico é aplicado paralelo à rede, os elétrons passam a ter um comportamento oscilatório, conhecido como *oscilações de Bloch*.

Para compreender melhor esse fenômeno, vamos utilizar um modelo semiclássico e analisar o comportamento do elétron sob influência de um campo elétrico uniforme. A partir do formalismo clássico de Hamilton, podemos obter a posição \mathbf{r} e o momento \mathbf{p} . Logo:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad \text{e} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \quad (2.11)$$

Quantizando o momento do elétron ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$), obtemos a velocidade de um pacote de onda:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{\partial(\epsilon(\mathbf{p}/\hbar) + V(\mathbf{r}))}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p}/\hbar)}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Essa velocidade também é conhecida como velocidade de transmissão de energia no meio. Temos ainda que:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

sendo $\hbar \dot{\mathbf{k}}$ a força elástica agindo sobre o elétron e $V(\mathbf{r})$ é a energia potencial do elétron em um campo eletrostático uniforme. Portanto:

$$\begin{aligned} \hbar \dot{\mathbf{k}} &= (-e)\mathbf{E} \\ \mathbf{k}(t) &= \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar}t + \mathbf{k}_0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Assim, sendo o espaço \mathbf{k} dividido em zonas de Brillouin, com vetor de rede recíproca $G = 2\pi/A$, obtemos:

$$\begin{aligned} \hbar G &= \hbar \frac{2\pi}{A} = (-e)ET \\ T &= \hbar \frac{2\pi}{(-e)EA} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Mas:

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2\pi}{T} \\ T &= \frac{2\pi}{\omega} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Igualando 2.16 com 2.15 obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\omega} &= \hbar \frac{2\pi}{(-e)EA} \\ \omega_B &= \frac{(-e)EA}{\hbar} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Tomando $\hbar = A = 1$, por simplicidade, então a *frequência de Bloch* ω_B é:

$$\omega_B = eF \quad (2.18)$$

Dessa forma, temos que as oscilações de Bloch são da ordem do campo elétrico externo.

Embora a proposta original ter sido formulada para sistemas cristalinos, este fenômeno também é encontrado na literatura em sistemas não cristalinos [28]. Mais recentemente, Dias e Lyra [29] apresenta que a interação entre duas partículas pode promover oscilações de Bloch coerentes entre as mesmas, proporcionando a observação de um dobramento da frequência de oscilação (frequência de Bloch). Um análogo óptico para este fenômeno tem sido observado em redes fotônicas, onde os autores sugerem tais sistemas como bons candidatos para ensaios experimentais dos estudos sobre transporte eletrônico.

Diante da fenomenologia apresentada, estudamos também a dinâmica dos dois elétrons em cadeias aperiódicas sujeitas a um campo elétrico externo e constante, alinhado paralelamente ao sentido da cadeia. Para isso, primeiro acrescentamos um termo referente ao campo externo no Hamiltoniano de Anderson-Hubbard, reescrevendo a equação 1.42 como:

$$H = J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} (\bar{\epsilon}_n + eFn) c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} \quad (2.19)$$

onde F é o campo elétrico uniforme externo, e é a carga da partícula e n é a posição da partícula. Dessa forma, a equação de recorrência 2.6 é reescrita como:

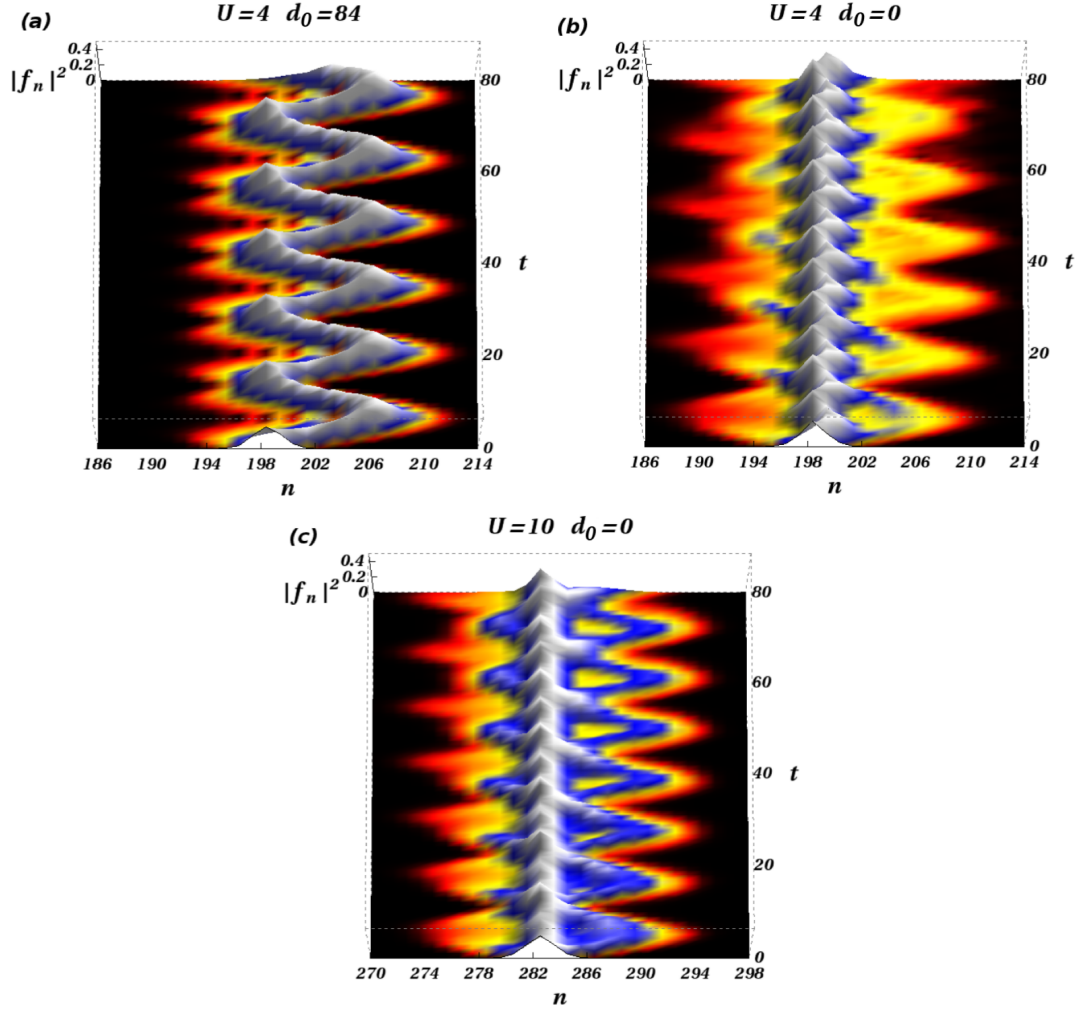
$$i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_2} + \mathcal{F}n_2 + U\delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2} \quad (2.20)$$

Aplicando os métodos numéricos discutidos na seção 2.3 obtivemos os estados eletrônicos e investigamos o padrão de oscilação do centroide do pacote de onda, definido pela equação 2.21:

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} (n_i) |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad \text{com } i = 1, 2 \quad (2.21)$$

Na figura 2.6 são mostrados os padrões de oscilação para uma rede de 500 sítios e campo externo $\mathcal{F} = 0.5$. Os resultados da figura 2.6 mostra um padrão oscilatório dos elétrons quando um campo externo é aplicado sobre a rede, concordando com o resultado mostrado anteriormente (figura 2.5). Além disso, na presença de interação (figuras 2.6b e 2.6c) a amplitude das oscilações diminui, principalmente para valores intermediários de U ($U = 4.0$). Isto está associado à existência de estados ligados, causados pela competição entre o movimento coerente e a repulsão entre os elétrons. Nessas oscilações coerente, os dois elétrons oscilam juntos, de modo que os sistema se comporta como se, ao invés de duas partículas, houvesse uma única partícula de carga $-2e$. Quando a interação é forte ($U =$

Figura 2.6: Centroide de 1 partícula, com $|f_n(t)|^2 = \sum_m |f_{n,m}(t)|^2$, na presença de um campo externo. Em (a), $U = 4.0$, $d_0 = 84$; em (b), $U = 4.0$, $d_0 = 0$; em (c) $U = 10.0$, $d_0 = 0$. Para valores intermediários de interação ($U = 4.0$), a amplitude de oscilação é menor quando as partículas iniciam seus movimentos no mesmo sítio ($d_0 = 0$), quando comparado com caso das partículas independentes ($d_0 = 84$)



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [26].

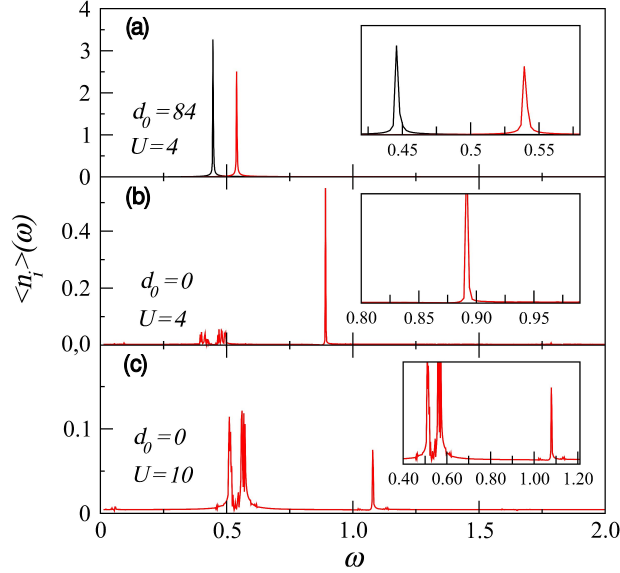
10.0) o caráter repulsivo predomina, diminuindo o grau de correlação no movimento dos elétrons.

Analisando o espectro das transformadas de Fourier de $\langle n_i(\omega) \rangle$, observamos a ocorrência de picos de oscilação para cada elétron. A figura 2.7 mostra os resultados obtidos para um sistema com as mesmas condições da figura 2.6.

Na figura 2.7a, onde os elétrons estão inicialmente afastados ($d_0 = 84$), podemos ver que os dois elétrons apresentam valores diferentes para a frequência, correspondente à cada elétron. Contudo, os valores encontrados estão próximos aos da frequência de Bloch ($\omega \approx F$), concordando com os argumentos semi-clássicos apresentados anteriormente. Além disso, observa-se que o padrão de oscilação não é afetado pela presença de interação, visto que $d_0 \gg \sigma$ e, portanto, os elétrons oscilam independentemente.

Quando os elétrons são colocados inicialmente no mesmo sítio, para $U = 4.0$ (figura

Figura 2.7: Transformadas de Fourier dos centroides mostrados na figura 2.6. Como pode ser observado, os picos das frequências de oscilação estão um pouco deslocados em relação ao esperado, de acordo com a aproximação semi-clássica ($\omega \approx F$). Além disso, para $U = 4.0$ e $d_0 = 0$, a frequência apresenta aproximadamente o dobro do valor do campo externo aplicado sobre a rede ($\omega \approx 2F$).



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [26].

2.7b), pode-se ver que há um pico de oscilação dominante, com frequência $\omega \approx 2F$, e uma pequena frequência de oscilação em torno de $\omega \approx F$. A primeira resulta do movimento coerente dos dois elétrons e é um fenômeno conhecido como dobramento de frequência das oscilações de Bloch. Já a outra frequência de oscilação correspondem às oscilações não coerentes, provenientes dos estados ligados. Ao aumentar o valor da interação para $U = 10.0$ (figura 2.7c), o caráter repulsivo da interação passa a dominar, diminuindo a dupla ocupação dos elétrons. Isso promove a re-amplificação da frequência ($\omega \approx F$), causada pelas oscilações independentes dos dois elétrons. Esses resultados estão de acordo com a literatura.

Os resultados apresentados na figura 2.7 mostra que há uma diferença entre os valores da frequência dominante observada e a frequência de Bloch. Isso sugere a existência de uma *força local* que contribui para a oscilação de Bloch. Para obter a força local, consideramos que a distribuição aperiódica é responsável por um campo local, definido por:

$$F_{loc} = \frac{d\epsilon_n}{n} \quad (2.22)$$

Assim, o campo efetivo sobre o elétron em um determinado sítio é:

$$F_{ef} = \frac{d\epsilon_n}{n} + F \quad (2.23)$$

Portanto, para deixar mais evidente a influência do campo local, baseados nestes argumentos semiclássicos, tomamos a derivada local de ϵ_n para a condição inicial dos elétrons

na mesma posição (ver figuras 2.7b e 2.7c). Assim, sendo $F = 0.5$ o valor do campo externo aplicado sobre a rede, então:

- Para $n_1^0 = n_2^0 = 199$:

$$\frac{d\epsilon_n}{n} \approx -0.053 \therefore F_{ef} = -0.053 + 0.5 = 0.447 \quad (2.24)$$

Logo, para $U = 4.0$: $\omega \approx 2F = \mathbf{0.894}$

- Para $n_1^0 = n_2^0 = 199$:

$$\frac{d\epsilon_n}{n} \approx 0.040 \therefore F_{ef} = 0.040 + 0.5 = 0.540 \quad (2.25)$$

Logo, para $U = 10.0$: $\omega \approx F = \mathbf{0.540}$

Assim, podemos observar que as frequências de oscilação apresentadas na figura 2.7 podem ser previstas semi-classicamente por meio da equação 2.23 e o valor dos campos locais.

CONCLUSÕES

Neste trabalho de mestrado estudamos a natureza dos os auto-estados de dois elétrons em uma cadeia aperiódica unidimensional. Nossa abordagem teve início considerando um hamiltoniano de dois elétrons indistinguíveis e itinerantes na cadeia aperiódica unidimensional. O potencial aperiódico ϵ_n foi considerado através de uma representação analítica simples: uma função harmônica de uma potencia ou seja $\epsilon_n = V \cos(\pi\alpha|n|^\nu)$. Portanto, cada elétron do Hamiltoniano esteve submetido ao termo de interação elétron-elétron e ao potencial aperiódico citado anteriormente. Para conduzir nosso trabalhos, inicialmente apresentamos uma revisão sobre modelos de condução eletrônica, onde abordamos as ferramentas teóricas necessárias ao nosso estudo. Em seguida, descrevemos com mais detalhes o formalismo físico-matemático empregado, o Hamiltoniano de Anderson-Hubbard, de onde obtemos as equações de de Schrödinger independente e dependente do tempo.

Aplicando a técnica de diagonalização direta, através do uso de rotinas Lapack, obtivemos os autovalores de energia em cadeias de $N = 90, 110, 130$ sítios. Visando investigar a influência da interação eletrônica sobre os auto-estados, calculamos a participação média. Verificamos que para $\nu \leq 1.0$ há uma dominância de estados estendidos no sistema, enquanto que para $\nu > 1.0$ os estados passam a ser localizados. Também observamos que a presença de interação causa uma diminuição na localização de Anderson. Os resultados estão de acordo com os resultados encontrados na literatura ([17, 21, 22, 23, 24]). Outra abordagem que consideramos foi a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Desta forma investigamos a dinâmica temporal de um pacote de onda de dois elétrons, inicialmente localizado próximo ao centro da cadeia. Analisando a extensão espacial do pacote de onda eletrônico, verificamos que no limite de fraca aperiodicidade ($\nu < 1$) o pacote de onda evolui de forma balística, independente da interação elétron-elétron. Esta dinâmica rápida está em boa concordância com a natureza deslocalizada dos auto-estados para $\nu < 1$ (ver figura 2.2).

Além do termo de interação Coulombiana e o potencial aperiódico diagonal, investigamos os efeitos de um campo elétrico estático paralelo a cadeia. O Hamiltoniano considerado foi modificado de maneira tal a incluir na diagonal do mesmo a energia potencial elétrica oriunda da interação dos elétrons com o campo estático. A solução do problema contendo energia Coulombiana, potencial aperiódico e termo de campo elétrico

foi feita através da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Para $\nu < 1$ observamos que devido ao campo elétrico externo os elétrons oscilam em torno de suas posições iniciais, num fenômeno conhecido como *oscilações de Bloch*. Ao investigarmos a extensão espacial, observamos que o campo elétrico externo induz uma redução da extensão, resultando na localização dinâmica do pacote de onda. A interação também promove um aprisionamento do pacote. Também estudamos os padrões de oscilação dos centroides e verificamos no espectro da transformada de Fourier que os elétrons apresentaram uma pequena diferença em suas frequências de oscilação, em relação à frequência de Bloch. A partir do campo efetivo atuando sobre cada elétron, vimos que existe um campo elétrico local, dependente da posição inicial dos elétrons, que contribui para a oscilação. Colocando os elétrons na mesma posição inicial, verificamos que a frequência de oscilação é influenciada pela interação, embora o padrão não seja alterado: na ausência de interação ou para uma interação forte a frequência de oscilação fica em torno de $\omega \approx F$, enquanto que para valores intermediários ocorre um fenômeno conhecido como dobramento de frequência das oscilações de Bloch ($\omega \approx 2F$), devido à existência de estados ligados.

Os principais resultados desta dissertação foram publicados na referência [26]. Como perspectiva de nosso trabalho podemos citar estudar o papel da dimensionalidade do sistema nesta fenomenologia. Desta forma, seria interessante investigar qual a natureza dos estados eletrônicos em sistemas aperiódicos bidimensionais.

REFERÊNCIAS

- [1] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. [S.l.]: Thomson Learning, 1976.
- [2] KITTEL, C. *Introduction to Solid State*. 7. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1996.
- [3] OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. de. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 1. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2005.
- [4] TIPLER, P.; MOSCA, G. *Física para Cientistas e Engenheiros - Física Moderna: Mecânica Quântica, Relatividade e Estrutura da Matéria*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [5] DIAS, W. da S. *Dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas e aperiódicas: Efeitos de campo elétrico*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Alagoas, 2007.
- [6] MOURA, F. A. B. F. de. *Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Alagoas, 1999.
- [7] LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. Disordered electronic systems. *Reviews of Modern Physics*, v. 57, p. 287, 1985.
- [8] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958.
- [9] THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Physics Reports*, v. 13, n. 3, p. 93–142, 1974.
- [10] ABRAHAMS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Physical Review Letters*, v. 42, n. 10, p. 673–676, 1979.
- [11] MOTT, N. F. The basis of the electron theory of metals, with special references to the transition metals series a. *Proceedings of the Physical Society of London*, v. 416, p. 416–422, 1949.
- [12] MOTT, N. F. Metal-insulator transition. *Reviews of Modern Physics*, v. 40, n. 4, p. 677–683, 1968.

- [13] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: John Wiley, 2005.
- [14] BRITO, P. E.; RODRIGUES, E. S.; NAZARENO, H. N. Two interacting electrons in one-dimensional deterministic aperiodic systems: Fibonacci and thue-morse lattices. *Physical Review B*, v. 73, p. 1–11, 2006.
- [15] RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 3, p. 515–518, 1997.
- [16] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society A*, v. 276, n. 1365, p. 238–257, 1963.
- [17] SHEPELYANSKY, D. L. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Physical Review Letters*, v. 73, n. 19, p. 2607–2610, 1994.
- [18] ANDERSON, E. et al. *Lapack users'guide*. [S.l.]: Society for Industrial and Applied Mathematic, 1999.
- [19] SOKOLOFF, J. B. Electron localization in crystals with quasiperiodic lattice potentials. *Physical Review B*, v. 22, n. 12, p. 5823–5828, 1980.
- [20] AZBEL, M. Y. Quantum particle in one-dimensional potentials with incommensurate periods. *Physical Review Letters*, v. 43, p. 1954–1957, 1979.
- [21] GRINIASTY, M.; FISHMAN, S. Localization by pseudorandom potentials in one dimension. *Physical Review Letters*, v. 60, n. 13, p. 1334–1337, 1988.
- [22] THOULESS, D. J. Localization by a potential with slowly varying period. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 18, p. 2141–2143, 1988.
- [23] SARMA, S. D.; HE, S.; XIE, X. C. Mobility edge in a model one-dimensional potential. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 18, p. 2144–2147, 1988.
- [24] SARMA, S. D.; HE, S.; XIE, X. C. Localization, mobility edges, and metal-insulator transition in a class of one-dimensional slowly varying deterministic potentials. *Physical Review B*, v. 41, p. 5544, 1990.
- [25] MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Physical Review Letters*, v. 81, p. 3735, 1998.
- [26] PEIXOTO, A. S. et al. Wavepacket dynamics of coupled particles in aperiodic chains: Weakening of anderson localization and local fields effects. *Physica A*, v. 394, p. 22–30, 2014.

-
- [27] MOURA, F. A. B. F. de et al. Bloch oscillations in an aperiodic one-dimensional potential. *Physical Review B*, v. 71, p. 1–6, 2005.
- [28] DOMÍNGUEZ-ADAME, F. et al. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Physical Review Letters*, v. 91, n. 19, p. 1–4, 2003.
- [29] DIAS, W. S.; LYRA, M. L. Non monotonic influence of hubbard interaction on the anderson localization of two-electron wavepackets. *Physica A*, 2014.