

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

WANDEARLEY DA SILVA DIAS

Propriedades de transporte em sistemas de
baixa dimensionalidade na presença de
interação

Maceió - Brasil
Julho - 2011

WANDEARLEY DA SILVA DIAS

Propriedades de transporte em sistemas de
baixa dimensionalidade na presença de
interação

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

Orientador:
Prof. Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura
Co-orientador:
Prof. Marcelo Leite Lyra

Maceió - Brasil
Julho - 2011

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

D541p Dias, Wandearley da Silva
Propriedades de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade na presença de interação / Wandearley da Silva Dias. - 2011.
148 f.: il. tabs., grafs.

Orientador: Francisco Anacleto B. Fidelis de Moura.
Co-orientador: Marcelo Leite Lyra.

Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física, Maceió, 2011.

Bibliografia: f. 101 – 112.
Apêndices: f. 113 – 116.
Anexos: f. 117 – 148.

1. Elétrons interagentes. 2. Elétron-elétron. 3. Transporte eletrônico. 4. Elétron-fônon. 5. Mágnon.
I. Título.

CDU: 538.935

Dedico esta tese
aos meus pais Deusdete e Eleusa,
ao meu irmão Wanderson e à Socorro.

In memoriam dos meus avós
Manoel José da Silva e Maria Madalena de Jesus

Agradecimentos

Chegar ao final desta etapa só me foi possível graças ao apoio de várias pessoas, para mim especiais. Por isso, a elas, os meus sinceros agradecimentos.

Aos meus pais, Deusdete e Eleusa, agradeço pelo amor, carinho, educação, incentivo, compreensão, enfim, por tudo que me proporcionaram durante toda a minha existência. A distância entre nós foi inevitável, a saudade foi/é muito grande, mas, sem o apoio de vocês nada seria possível.

Ao meu irmão Wanderson, outra pessoa de extrema importância para mim, agradeço pelos vários momentos de descontração, confiança, paciência e carinho... A distância e o tempo apresentaram-me outras faces deste grande amigo a quem pude recorrer por diversas vezes.

À Socorro, agradeço eternamente pelo amor e carinho, amizade, companheirismo e compreensão. Agradeço também a pequena Dianinha que trouxe mais alegria a nossas vidas nos últimos tempos.

Ao meu orientador Prof. Francisco Fidélis, agradeço pela grande paciência, prestatividade e pelos conhecimentos transmitidos no decorrer dos estudos presentes neste trabalho. Além disto, a minha admiração quanto a sua eficiência e agilidade ao desenvolver suas atividades. O seu caráter humano aliado à sua competência profissional mostram o grande orientador que é e com o qual tive/tenho oportunidade de trabalhar. Pilar principal do Laboratório de Física Computacional, agradeço toda atenção para com o laboratório, permitindo que todos do grupo de física teórica e computacional realizem cálculos numéricos. É indispensável agradecer os importantes conselhos nos âmbito acadêmico e pessoal, bem como os vários momentos de descontração, com boa conversa, histórias e resenhas.

Ao prof. Marcelo Lyra agradeço pelos conhecimentos transmitidos e pelo incentivo à busca de novos horizontes. Sua experiência e “percepção da física” desempenharam um papel relevante na pesquisa científica e organização dos trabalhos aqui apresentados.

No quesito hospitalidade, não poderia deixar de agradecer os bons momentos de conversa e diversão de Marcelo Lyra, juntamente com sua esposa Alda e suas filhas Amanda e Mariana, bem como a prof^a. Tereza, seu marido Eduardo e sua filha Camila. Não posso deixar de mencionar a atenção e amizade de Ítalo. Esses bons momentos são de extrema importância para quem está muito longe da terra Natal.

Sou grato a Luizdarcy e Jorge Anderson, dois grandes professores que tive na graduação. Responsáveis pelos primeiros degraus na minha carreira acadêmica, seus incentivos foram de grande importância para alcançar este estágio.

A todos os meus familiares que também fizeram parte desta conquista, gostaria de agradecer o grande apoio recebido. Dentre estes, um caráter especial à minha tia, madrinha e “segunda-mãe” Neide, pelo imenso carinho a mim dedicado; minhas tias Heliana e Geni; e meu primo Darcílio pelos bons momentos de conversa e descontração;

Aos amigos que, mesmo distante, torceram e me incentivaram a chegar ao término desta etapa: Konja, Sérgio, Romária, Cristiane, Mônica, Hélio, Dênis e minha maninha Wilma.

Ao casal Elton e Sybelle pela amizade e prestatividade em diversos momentos. Ao casal Rogério e Valdirene pela amizade, confiança e auxílio em momentos bastante difíceis. Ao

casal Vinícius e Ahiranie pelos bons momentos de descontração.

Não poderia deixar de agradecer o agradecer à *pilantragem*: Nuccia Carla, Lidiane, André, Satiko, Neto e Henrique. Sem palavras para suas resenhas...; Aos meus conterrâneos Weslen e Rafael pela amizade e companherismo; Tiaguinho pelas conversas, incentivos e práticas esportivas; Askery e Willamys pelos campeonatos e resenhas compartilhadas; Cristiane Muritiba com suas palavras de apoio e resenhas; Fábio Zanetti pela amizade, boas conversas e ajuda na confecção de gráficos 3D.

Aos professores das disciplinas que cursei, especialmente a Dilson e Marcelo Lyra.

Aos alunos Elder, Anthony, Tiago Rodrigues e Vanessa, agradeço pela compreensão quando não lhes fora oferecida a devida atenção.

Aos funcionários do IF que sempre contribuem para o bem estar de todos.

Ao CNPq e CAPES pelo apoio financeiro do mestrado em boa parte do meu Doutorado.

Agradeço, em especial, a Deus por ter me dado força, capacidade e saúde para chegar até aqui e por possibilitar a existência de tantas pessoas importantes em minha vida.

“...não se trata de quão forte pode bater.
Se trata de quão forte pode ser atingido e continuar seguindo em frente,
quanto você pode apanhar e continuar seguindo em frente.
É assim que a vitória é conquistada!!!...”
(Filme Rocky Balboa)

Resumo

Em estudos de transporte eletrônico é notável e necessário o surgimento de novos ingredientes contidos nos modelos, visando cada vez mais a compreensão e aprimoramento do conhecimento sobre o comportamento das partículas e quasipartículas em diversos sistemas. Abordagens teóricas capazes de incorporar interações em sistemas de muitos corpos não são nada fáceis. Entretanto, trabalhos recentes envolvendo sistemas de baixa densidade eletrônica tem revelado aspectos físicos relevantes que auxiliam o entendimento das propriedades de sistemas com partículas interagentes de densidade finita. Dentro deste contexto, nós investigamos o papel da interação entre partículas e/ou quasipartículas em sistemas de baixa dimensionalidade. Tratamos sistemas de baixa densidade de elétrons ou excitações elementares através de métodos numéricos destinados à solução da equação de Schrödinger independente e dependente do tempo. Sendo um pouco mais específico, o primeiro trabalho leva em consideração a interação entre duas excitações magnéticas (mágnons) em uma cadeia com desordem correlacionada de longo alcance. Tomando uma cadeia de spins $S = 1/2$, a interação é adotada ao assumirmos a proibição de dupla excitação num único sítio. Outros dois trabalhos são destinados ao papel da interação entre dois elétrons de spins opostos. Considerando uma interação *on-site*, são investigados os aspectos inerentes à interação quando os dois elétrons estão em cadeias cristalinas e com desordem correlacionada. Além disso, nos dois sistemas são apresentados a influência de um campo elétrico externo sobre a dinâmica dos pacotes de onda. Por fim, são tratados a ação de outro tipo de interação sobre a dinâmica do pacote de onda eletrônico. Assumindo que os íons da rede possuem um pequeno movimento oscilatório em torno do ponto de equilíbrio, surge uma interação da função de onda eletrônica com esta rede que possui estes modos de vibração, dando origem a um tipo de interação conhecida usualmente como interação elétron-fônon. Esta interação, capaz de proporcionar o aprisionamento do pacote de onda conhecido como *self-trapping*, é apresentada em dois diferentes contextos: apresenta-se a comparação deste auto-aprisionamento (*self-trapping*) entre redes 2D de organização atômica tipo quadradas e honeycomb; enquanto que no outro apresenta-se a influência da interação coulombiana entre dois elétrons de spins opostos sobre o fenômeno de self-trapping em uma cadeia cristalina.

Palavras-chave: 1. Elétrons interagentes. 2. Transporte eletrônico. 3. Elétron-elétron. 4. Elétron-fônon. 5. Mágnon.

Abstract

In studies of electronic transport is remarkable and requires the development of new ingredients contained in the models, aiming at increasing the understanding and improvement of the knowledge about the behavior of particles and quasiparticles in several systems. Theoretical approaches able to incorporate interactions in many-body systems are not easy. However, recent studies involving low-density electronic systems has revealed important physical aspects that help to understand the properties of systems with interacting particles of finite density. Within this context, we investigated the role of interactions between particles and/or quasiparticles in low dimensional systems. We treat systems with low density of the electrons or elementary excitations by using numerical methods for the solution of time dependent and dependent Schrödinger equation. Being a little more specific, the first study considers the interaction between two magnetic excitations (magnons) in a chain with long-range correlated disorder. Taking a chain of spin $S = 1/2$, the interaction is taken to assume the prohibition of double excitation in one spin. Two other studies are intended for the role of interaction between two electrons opposite spins. By using an on-site interaction, we are investigated aspects related to the interaction when two electrons are in crystalline chains and chains with correlated disorder. Moreover, in both systems are shown the influence of an external electric field on the wave packets dynamics. Finally, We are treated an another type of interaction on the dynamics of electron wave packet. Assuming that the lattice ions have a small oscillatory motion around the equilibrium point, arises an interaction of the electronic wave function with this lattice that has these modes of vibration, resulting in a kind of interaction usually known as electron-phonon interaction. This interaction, able to trap the wave packet is known as *self-trapping* is presented in two different contexts: we offer the comparative study of this self-trapping between lattices of 2D atomic organization type square and honeycomb, while the other shows the influence of Coulomb interaction between two electrons of opposite spins on the phenomenon of self-trapping in a crystal chain.

Keywords: 1. Interacting electrons. 2. Electronic transport. 3. Electron-electron. 4. Electron-phonon. 5. Magnon.

Sumário

1	Introdução	1
2	Fundamentação Teórica	4
2.1	Os primeiros modelos de condução	4
2.2	Periodicidade da rede e o teorema de Bloch	6
2.3	Desordem, interação e transição metal-isolante	8
2.3.1	Existência de desordem e o isolante de Anderson	8
2.3.2	Teoria de Escala da localização	12
2.3.3	Exceções da teoria de escala: existência de aperiodicidade e correlação	18
2.3.4	Interação elétron-elétron e o isolante de Mott	24
2.3.5	Dois elétrons interagentes	27
3	Dois mágnons em cadeias ferromagnéticas com desordem correlacionada	29
3.1	Ferromagnetismo e modelo de Heisenberg	29
3.2	Onda de Spin: Mágnon	31
3.3	Excitação de 2 Mágnons em cadeias com desordem correlacionada	35
3.3.1	Excitação de 2 Mágnons em cadeias ferromagnéticas	35
3.3.2	Distribuição correlacionada de longo alcance nos termos de exchange	42
3.3.3	Resultados	43
4	Dois elétrons interagentes em cadeias puras e com desordem	51
4.1	Dois elétrons interagentes em sistemas 1D	51
4.1.1	Equação de Schrödinger	51
4.1.2	Campo Elétrico	57
4.2	Cadeias cristalinas	62
4.2.1	Resultados	63
4.3	Cadeias com desordem correlacionada de longo alcance	70
4.3.1	Resultados	71
5	Interação elétron-fônon	80
5.1	Equação de Schrödinger não linear	80
5.2	Interação elétron-fônon em redes quadradas e hexagonais	84
5.2.1	Análise da rede hexagonal a partir da rede quadrada	85

5.2.2	Resultados	87
5.3	Coexistência de interação elétron-fônon e interação elétron-elétron	91
5.3.1	Dois elétrons interagentes em cadeias não lineares	91
5.3.2	Resultados	93
6	Conclusões	97
	Referências	101
	Apêndices	113
A	Dedução do Teorema de Bloch	113
B	Expansão de Taylor do operador evolução temporal	115
	Anexos	117
A	Artigo: Transição tipo Kosterlitz-Thouless em redes 2d	117
B	Artigo: Dois Mágons em cadeias ferromagnéticas com desordem correlacionada	122
C	Artigo: Dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas	130
D	Artigo: Dois elétrons interagentes em cadeias com desordem correlacionada	136
E	Artigo: Interação elétron-fônon em redes quadradas e hexagonais	144

1

Introdução

Estudos sobre as propriedades de transporte envolvendo as interações entre elétrons têm sido relatadas desde a década de 1930[1]. Estes estudos foram motivados por resultados experimentais da condutividade em amostras de óxidos de metais de transição (como óxido de níquel NiO e óxido cuproso Cu_2O)[2]. Embora fosse previsto um comportamento metálico, observou-se experimentalmente um comportamento isolante. Alguns anos depois, em 1949, N. F. Mott¹ propôs um modelo capaz de explicar os resultados experimentais obtidos para óxidos de metais de transição[3]. Nestes compostos, a formação de um gap de energia, impedindo a condução, pode ser entendida como uma competição entre o potencial Coulombiano U dos elétrons na camada $3d$ e o hopping entre os átomos vizinhos.

Abordagens teóricas capazes de incorporar a interação elétron-elétron em sistemas de muitos corpos não são nada fáceis. O modelo mais simples de partículas interagentes em uma rede, capaz de explicar as teorias dos isolantes de Mott, é o modelo de Hubbard[4]. Embora simples, a obtenção de sua solução para o estudo das propriedades físicas do sistema não é trivial. Algumas das dificuldades encontradas tem origem na natureza não perturbativa do problema, uma vez que, em geral, o termo de interação não é pequeno suficiente para ser um parâmetro na expansão perturbativa. Outras dificuldades são devido o crescimento exponencial do esforço computacional para a técnica de diagonalização exata, uma vez que o número de configurações eletrônicas cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Apenas em uma dimensão são encontradas soluções exatas para o problema com interação elétron-elétron em sistemas de muitos corpos[5, 6, 7, 8, 9]. Neste contexto, um modelo baseado em apenas duas partículas interagentes[10] tem sido muito explorado por apresentar aspectos físicos relevantes que auxiliam o entendimento das propriedades de sistemas com partículas interagentes de densidade finita, principalmente no que diz respeito a sistemas de elétrons interagentes na presença de desordem [11, 12, 13, 14]. Os trabalhos aqui apresentados seguem a mesma linha de raciocínio dos trabalhos acima, pois visamos observar aspectos físicos relevantes presentes em sistemas de muitos corpos através de sistemas de poucas partículas interagentes.

¹Sir Nevill Francis Mott ganhou o Prêmio Nobel de Física em 1977 por seu trabalho sobre a estrutura eletrônica de sistemas magnéticos e desordenados, especialmente semicondutores amorfos. O prêmio foi compartilhado com a P. W. Anderson e J. H. Van Vleck, que tinha desenvolvido estudos independentes.

Outras duas classes de estudo que tem sido amplamente estudadas é a influência da desordem e da não linearidade sobre a dinâmica eletrônica. O comportamento eletrônico do sistema sofre influência significativa na presença de desordem, visto que este ingrediente é capaz de promover a localização do pacote de onda eletrônico [15, 16, 17, 18]. A presença deste ingrediente dá origem a aspectos físicos importantes, levando-nos a uma descrição um pouco mais perto da realidade, visto que uma estrutura cristalina perfeita e homogênea dos sólidos encontrados na natureza ou mesmos daqueles produzidos em laboratório é impossível até o presente momento. Por outro lado, dentro do contexto de transporte eletrônico, a não linearidade surge da existência de um termo vibracional da rede no Hamiltoniano de transporte eletrônico numa rede, simbolizando a interação elétron-fônon [19, 20]. Seu papel sobre a dinâmica eletrônica tem se apresentado relevante, visto que este acoplamento elétron-fônon é capaz de promover a localização da função de onda eletrônica, fenômeno este conhecido como *self-trapping* (auto-aprisionamento) [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29].

Do ponto de vista experimental, o rápido avanço em pesquisas envolvendo átomos ultrafrios² realizados em experimentos de redes ópticas tem mostrado que tais sistemas são promissores “simuladores quânticos” para os sistemas anteriormente mencionados. O termo “simuladores quânticos” está diretamente relacionado ao fato de que tais experimentos tem apresentado vários conceitos e propriedades básicas de física da matéria condensada, permitindo o controle de parâmetros como: a interação em sistemas fermiônicos de muitos corpos em uma rede [30, 31]; espaçamento de rede e distribuição de vários potenciais com controle quase completo [32].

Outra característica presente nos estudos apresentados nesta tese é que todos são desenvolvidos em sistemas de baixa dimensionalidade. Com o advento da tecnologia de manufatura de materiais em escala nanoscópica, os sistemas de baixa dimensionalidade deixaram de ser problemas de interesse acadêmico para serem sistemas fisicamente realizáveis. A tecnologia atual é capaz de fabricar estruturas em que uma ou mais dimensões são confinadas de tal maneira que os graus de liberdade transversais encontram-se congelados em temperaturas suficientemente baixas [33, 34, 35]. Uma fonte de grande interesse por esses sistemas é o estudo das propriedades de transporte.

Desta forma, os trabalhos apresentados nesta tese buscam contribuir para o entendimento de aspectos físicos de sistemas interagentes com baixa densidade de partículas e/ou excitações, por acreditar que tais aspectos físicos são relevantes no entendimento das propriedades de sistemas interagentes com maior densidade de partículas. O corpo desta tese está dividida da seguinte maneira:

O capítulo 2 é destinado a fundamentação teórica para todos os estudos apresentados nos capítulos seguintes. Serão apresentados alguns modelos utilizados em estudos de transporte eletrônico como o modelo de Bloch, Anderson e Hubbard. Cada um dos modelos será contextualizado com estudos teóricos e experimentais desenvolvidos, apresentando os seus respectivos aspectos físicos característicos.

O capítulo 3 serão apresentados estudos sobre excitações coletivas de spin $S = 1/2$ em sistemas unidimensionais. Mais especificamente, nós trataremos um sistema quântico

²Átomos ultrafrios (em inglês *Ultracold atoms*) é um termo usado para descrever átomos que são mantidos em temperaturas próximas ao zero absoluto, onde suas propriedades quânticas tornam-se relevantes.

de spins ferromagnéticos cujos acoplamentos entre os spins apresentam uma distribuição aleatória com correlação de longo-alcance. São estimuladas duas excitações ou dois “spin-flips”, dando origem a duas excitações coletivas, conhecidas como mágnons. Os efeitos de interação surgem ao proibirmos a dupla excitação em um único spin, visto que se trata de um sistema de spin $S = 1/2$. Nossos estudos são inicialmente direcionados à caracterização da natureza dos auto-estados de dois mágnons. Para isto, é resolvida a equação de Schrödinger independente do tempo. Em seguida é investigado a evolução temporal de um pacote de onda formado por dois “spin-flips” tomando uma distância inicial entre eles dada por d_0 .

No capítulo 4 são apresentados estudos sobre sistemas de elétrons interagentes em sistemas unidimensionais. A interação entre os dois elétrons de spins opostos é de origem coulombiana e *on-site*, ou seja, a interação ocorre somente quando os dois elétrons estão no mesmo sítio atômico. Avaliamos os estados eletrônicos e o aspecto dinâmico dos pacotes de onda eletrônico em cadeias cristalinas e com desordem correlacionada de longo alcance na distribuição dos potenciais. Isto é possível mediante as soluções das equações de Schrödinger independente e dependente do tempo. Mostraremos a coexistência de auto-estados estendidos e localizados próximos ao centro da banda, quando o sistema possui desordem na distribuição dos potenciais. A interação promove uma distribuição dos espaçamentos de níveis tipo Poisson, independente do grau de interação. Além disso, em ambas as cadeias, nós investigamos a influência de um campo elétrico externo constante sobre o comportamento dinâmico dos pacotes de onda.

No capítulo 5 são investigados a ação de outro tipo de interação sobre a dinâmica do pacote de onda eletrônico. Como dito anteriormente, assumindo que os íons da rede possuem um pequeno movimento oscilatório em torno do ponto de equilíbrio, torna-se necessário levar em consideração a existência de modos vibracionais da rede, ou seja, a existência de fônons. A interação da função de onda eletrônica com esta rede que possui estes modos de vibração dá origem a um tipo de interação, conhecida usualmente como interação elétron-fônon. Esta interação, após exceder um valor crítico, promove uma localização do pacote de onda eletrônico conhecido como auto-aprisionamento (*self-trapping*) [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Dentro deste contexto, nossos estudos foram direcionados a dois modelos. No primeiro nós realizamos um estudo comparativo do fenômeno de *self-trapping* em redes 2D quadradas e hexagonais (*honeycomb*). Considerando sistemas cristalinos, nós mostramos a dependência do fenômeno com a topologia da rede. Mostramos que o parâmetro crítico da interação elétron-fônon que governa o *self-trapping* escala linearmente com a função participação inicial independente do tipo de rede. Além disso, mostramos que o número de coordenação da rede é um parâmetro topológico importante para a transição estendido/self-trapped. No segundo modelo nós investigamos a coexistência de interação elétron-elétron e interação elétron-fônon numa cadeia cristalina. Considerando um sistema de dois elétrons de spins opostos, nossos resultados mostram que a magnitude da interação elétron-fônon necessária para promover o *self-trapping* é menor quanto maior for o valor da interação elétron-elétron.

O capítulo 6 apresentamos uma síntese dos resultados, suas conclusões e perspectivas.

2

Fundamentação Teórica

As propriedades de transporte eletrônico em sólidos tem ocupado uma posição de destaque no estudo da Física da Matéria Condensada desde o fim do século XIX. Ao longo dos anos foram construídos modelos baseados nas formulações da mecânica estatística e mecânica quântica visando o entendimento das propriedades apresentadas por certos materiais. Em linhas gerais, podemos dizer que estes modelos são apresentados com o intuito de explicar propriedades características de certos materiais ou prever características ou fenômenos não observados. Dentro deste contexto, neste capítulo serão apresentados modelos que contribuíram para o entendimento do comportamento do pacote de onda eletrônico na presença de certos ingredientes, como periodicidade da estrutura cristalina, desordem na estrutura cristalina e interação entre elétrons.

2.1 Os primeiros modelos de condução

O estudo das propriedades eletrônicas em estruturas cristalinas é um campo de bastante relevância na Física do Estado Sólido. A descoberta do elétron¹ motivou os estudos sobre os mecanismos da condução elétrica nos sólidos. Os modelos clássicos iniciais tratavam os elétrons como partículas clássicas colidindo com os íons da rede, agindo como um “jogo de pinball”. O primeiro deles foi proposto por P. Drude, em 1900, para explicar as propriedades de transporte de elétrons em materiais (especialmente em metais)[36, 37]. O **Modelo de Drude**, baseado na teoria cinética dos gases, assume que os elétrons da camada de valência movem-se livremente pelo metal enquanto os íons (positivos) permanecem imóveis. No contexto metálico, estes elétrons são chamados de elétrons de condução. Desta forma, o modelo de Drude apresenta dois tipos de partículas, diferente dos modelos de gases simples. Diferente do modelo do gás clássico, os elétrons de condução não colidem entre si (conhecida como aproximação de elétrons independentes), mas sim com os íons positivos. Estes íons formados por elétrons que estão fortemente ligados ao núcleo agem como esferas sólidas, entidades indivisíveis e inertes. Desta forma, o metal é visualizado como um arranjo tridimensional regular de íons com um grande número de elétrons livres para se moverem por todo o seu volume. Todos os elétrons movem-se com uma velocidade dada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. A velocidade média do elétron

¹O elétron foi descoberto por J. J. Thomson em 1897 no Laboratório Cavendish, da Universidade de Cambridge, enquanto estudava o comportamento dos raios catódicos.

imediatamente após a colisão é zero.

Os principais sucessos do modelo de Drude consistiram, principalmente, na dedução da lei de Ohm da condução elétrica e na obtenção da relação entre as condutividades elétrica e térmica, lei de Wiedemann-Franz-Lorentz²[38]. Entretanto, certas incongruências com resultados experimentais, como por exemplo a dependência errada na temperatura para a condutividade elétrica, motivaram a busca por modelos mais precisos.

Com o início da teoria quântica e surgimento do princípio de exclusão de Pauli³, os elétrons em metais não mais poderiam ser tratados como partículas clássicas. Sommerfeld aplicando as idéias de mecânica quântica aos princípios do modelo de Drude para metais, resolveu alguns problemas de predição das propriedades térmicas do modelo[39]. Grosso modo, podemos dizer que Sommerfeld substituiu a distribuição de velocidades eletrônica de Maxwell-Boltzmann pela distribuição de Fermi-Dirac. No **Modelo de Sommerfeld** o cristal é assumido como um grande número de elétrons em uma “caixa de energia potencial” em que sua parede possui um potencial muito alto para que os elétrons estejam restritos a permanecer no interior do cristal, mas livre para se mover dentro de seus limites. Este confinamento dos elétrons na “caixa de energia potencial” representa a atração Coulombiana entre elétrons e íons da rede.

Embora o modelo de Sommerfeld eliminasse algumas incongruências do modelo anterior, existiam pontos que contradiziam a observação experimental, como por exemplo: O coeficiente Hall, apresentado teoricamente com um valor constante, mas experimentalmente depende do campo magnético e da temperatura; A dependência da temperatura da condutividade DC elétrica não apresentada teoricamente; A previsão teórica de que a condutividade elétrica é diretamente proporcional a concentração de elétrons, embora existam metais divalentes e trivalente que apresentam menor condutividade que metais monovalentes. Além disso, algumas questões fundamentais não são explicadas, como por exemplo: O que determina o número de elétrons de condução e o que explica alguns elementos sólidos serem metais e outros serem isolantes.

Diante dos questionamentos existentes, mais uma vez se fez necessário a formulação de um modelo de condução. Um dos pontos “atacados” pela nova formulação foi a influência dos íons sobre os elétrons, uma vez que a interação elétron-íon é desprezada entre as colisões (conhecida como aproximação de elétron livre) nos modelos anteriores. De fato, os elétrons em um metal não movem-se em um potencial constante, e sim em um potencial periódico cuja periodicidade é igual ao da rede⁴. Assim, abandonando a aproximação de elétron livre, F. Bloch apresentou um modelo quântico que leva em consideração a interação dos elétrons com os íons da rede[40].

²Assim conhecida devido aos seus descobridores Gustav Wiedemann, Rudolph Franz e Ludvig Lorenz. G. Wiedemann e R. Franz mostraram em 1853 que a razão entre a condutividade térmica e da condutividade elétrica tem aproximadamente o mesmo valor para diferentes metais na mesma temperatura. Ludvig Lorenz mostrou em 1872 que a razão entre a condutividade térmica e da condutividade elétrica é proporcional a temperatura.

³O princípio de exclusão de Pauli é um princípio da mecânica quântica formulado por Wolfgang Pauli (1900 - 1958) em 1925

⁴Após a descoberta dos raios X foi possível a comprovação de vários cálculos e previsões teóricas simples sobre o espaçamento atômico médio, também chamado de parâmetro de rede.

2.2 Periodicidade da rede e o teorema de Bloch

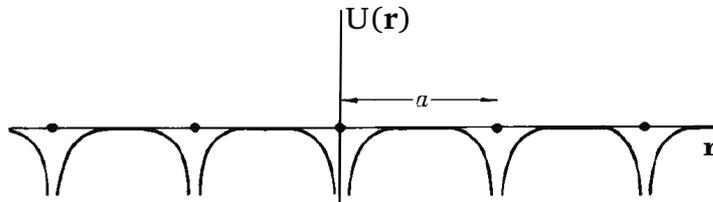
A descoberta dos raios X proporcionou vários estudos na área científica, principalmente no estudo da estrutura da matéria. Por meio de raios X foi estabelecido a estrutura periódica e ordenada dos cristais. Assumir esta característica em seu modelo apresenta ser um dos papéis fundamentais na descrição do movimento de elétrons de condução apresentado no **modelo de Bloch**[40]. Uma vez que a periodicidade da rede possui o tamanho típico do comprimento de onda de de Broglie para um “elétron de Sommerfeld”, usar a periodicidade da rede, a interação elétron-íon e a mecânica quântica em seu modelo foram seus triunfos.

Considere um sólido de Na. Cada átomo contém 11 elétrons, porém 10 destes elétrons estão suficientemente ligados ao seu núcleo, formando um íon de carga positiva $+e$. Quando os átomos estão próximos, formando o sólido, a superposição dos orbitais faz com que seja considerado a existência de elétrons completamente localizados e elétrons de condução. Dentro deste cenário, Bloch adota, em seu modelo, a aproximação de elétrons independentes, ou seja, as interações entre elétrons são desprezadas. Assim, o “elétron de Bloch” interage somente com os íons de rede, representado por um potencial de interação $U(\mathbf{r})$. Devido a periodicidade da rede (todos os átomos são iguais e igualmente espaçados), temos

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

onde \mathbf{a} é um vetor da rede de Bravais, como representado na figura 2.1.

Figura 2.1: Representação padrão de um potencial periódico $U(\mathbf{r})$ para um cristal unidimensional.



Fonte: C. Kittel, 1976 (referência [41]).

Estas considerações fazem com que a função de onda eletrônica deva satisfazer a equação de Schrödinger

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

Em função da periodicidade da rede, esta equação permanece a mesma ao substituirmos \mathbf{r} por $\mathbf{r} + \mathbf{a}$ nos operadores que agem sobre ψ . O teorema de Bloch mostra que as soluções da equação 2.2 devem ter a forma

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.3)$$

onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tem a periodicidade da rede, com $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$. O subscrito \mathbf{k} indica que a função $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ depende do vetor de onda \mathbf{k} . O subscrito n caracteriza as múltiplas

soluções ($E_n(\mathbf{k})$) para um dado \mathbf{k} . Funções do tipo 2.3 são conhecidas como funções de Bloch. Em amostras macroscópicas, o espaçamento entre níveis de energia são infinitesimais, de maneira que o espectro de energia $E_n(\mathbf{k})$ aproxima-se de uma função contínua, sendo assim conhecida como banda de energia. Podemos notar que estas soluções são compostas de ondas planas moduladas por uma função de onda periódica, cuja periodicidade é igual a da rede. Elas representam o elétron que propaga através do campo potencial dos íons da rede.

A equação 2.3 é sempre apresentada uma vez que ela permite uma conexão mais direta com o modelo de elétrons livres, sendo $U(\mathbf{r}) = 0$ e $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow \text{constante}$. Entretanto, a equação 2.3 combinada com $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ implica que

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

Esta igualdade é conhecida como teorema de Bloch (ver apêndice A1).

Através deste modelo em que um elétron está contido em uma rede periódica e interage somente com os íons da rede, vários fatos importantes foram compreendidos e revelados. Um destes fatos é que a função de onda do elétron se estende por todo o sistema. Outra importante consequência foi a explicação da diferença entre condutores, isolantes e semicondutores, proposta inicialmente por Wilson[42]. A distinção fundamental entre isolantes sólidos e metais pode ser obtida através da aplicação da estatística de Fermi-Dirac e princípio da Exclusão de Pauli aos estados de Bloch do cristal. A explicação está relacionada ao surgimento de bandas de energia proibidas devido a estrutura periódica do cristal, proposta inicialmente por Morse[43] e Peierls[44]. Num cristal, em que um grande número de átomos se encontram ligados muito próximos uns dos outros, os níveis de energia dos átomos transformam-se em bandas de energia permitidas. Assim, os elétrons são organizados em bandas de energia, sendo estas bandas separadas por regiões em energia que nenhum orbital eletrônico existe (conhecido como gap de energia).

Em linhas gerais, o cristal comporta-se como isolante quando as bandas de energia estão totalmente preenchidas ou vazias - os elétrons mais energéticos não podem ser excitados facilmente para níveis de energia superiores, pois a diferença de energia entre as bandas é de algumas dezenas de eV . O cristal comporta-se como condutor se uma ou mais bandas são parcialmente preenchidas - os elétrons mais energéticos podem ser excitados facilmente para níveis de energia superiores, tornando-se elétrons de condução. Num semicondutor a diferença de energia entre a banda preenchida e a banda vazia é menor que a observada nos isolantes (cerca de $1 eV$) - desta forma os elétrons mais energéticos podem ser excitados facilmente para níveis de energia superiores. Além disso, a condutividade nos semicondutores não é causada apenas pelos elétrons que conseguiram pular para a banda de condução. Os buracos, também chamados de lacunas, que eles deixaram na banda de condução também dão contribuição importante. Tão importante que estes buracos são tratados como partículas normais com carga positiva, oposta à do elétron[45].

Incontestavelmente, Felix Bloch⁵ foi uma figura histórica no desenvolvimento da fí-

⁵Felix Bloch (1905-1983) foi um físico Suíço laureado, juntamente com Edward Mills Purcell, com o Nobel de Física em 1952, pelo “desenvolvimento de novos métodos de medição precisa do magnetismo

sica no século XX. Não se pode negar a relevância dos seus “primeiros esforços em teoria quântica dos metais e sólidos” (modelo de Bloch) no contexto de Física do Estado Sólido. É importante observar que o presente modelo considera o elétron num sistema cristalino perfeito, homogêneo, além de desprezar a interação entre elétrons de condução. Entretanto, a estrutura cristalina dos sólidos encontrados na natureza, e mesmos os produzidos em laboratório, não é perfeita e homogênea. Deve-se lembrar também que os elétrons contidos num sólido qualquer estão sujeitos a interações Coulombianas não só com os íons, mas também com os demais elétrons da rede. Veremos a seguir modelos específicos utilizados nos estudos das propriedades de transporte eletrônico na presença destes ingredientes (desordem e interação entre elétrons).

2.3 Desordem, interação e transição metal-isolante

Sabemos que não existe uma estrutura cristalina perfeita e homogênea dos sólidos encontrados na natureza ou mesmos daqueles produzidos em laboratório. Além disso, devemos lembrar que as propriedades de condução de um material são associadas ao transporte de cargas elétricas. Num sólido existem um número grande de elétrons, da ordem do número de Avogadro, de maneira que a interação entre estes deve ser levada em conta em questões envolvendo as propriedades de condução. De fato, o comportamento do pacote de onda eletrônico sofre influência significativa na presença de desordem [15, 16, 17, 18] e interação elétron-elétron[3, 4, 46, 47]. Estes ingredientes podem fazer com que o sistema apresente um comportamento típico de isolante, em que a função de onda eletrônica torna-se localizada numa região finita da rede.

Diante dos ingredientes acima apresentados, podemos dizer que existem outros dois tipos de isolantes:

1. Isolante de Anderson.
2. Isolante de Mott.

Ao primeiro podemos associar aos efeitos da distribuição dos íons da rede, enquanto que o segundo à interação Coulombiana elétron-elétron. Vejamos a seguir os modelos que estudam a influência destes ingredientes, separadamente, sobre a função de onda eletrônica.

2.3.1 Existência de desordem e o isolante de Anderson

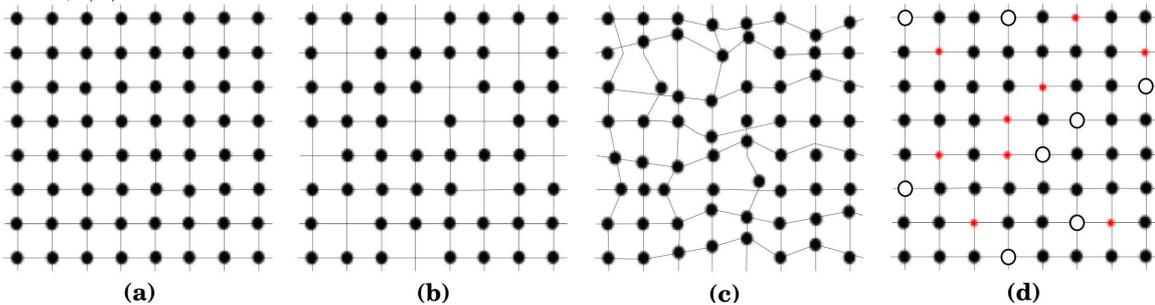
Em 1958, P.W. Anderson⁶ apresentou à comunidade científica um modelo que leva em consideração os efeitos de desordem sobre a função de onda eletrônica [15]. Anderson apontou que a função de onda eletrônica pode ser alterada na presença de desordem, sendo possível observar a ausência de difusão eletrônica, ou seja, a existência de um caráter isolante do material.

nuclear e descobertas afins”, nomeadamente a ressonância magnética nuclear (RMN).

⁶Philip Warren Anderson (1923-): Físico Norte-Americano laureado com o Nobel por suas contribuições às teorias da localização, antiferromagnetismo e supercondutividade de alta temperatura.

O termo desordem está vinculado a estrutura cristalina, caracterizando imperfeições estruturais da rede (distribuição dos átomos não seguindo uma periodicidade espacial) ou imperfeições composicionais (existência de diferentes átomos ou lacunas), como pode ser visto na representação apresentada na figura 2.2.

Figura 2.2: Representação de uma rede quadrada 2D com diferentes tipos de desordem. (a) Rede cristalina perfeita; (b) Vacâncias ou lacunas distribuídas aleatoriamente; (c) Deslocamentos de rede; (d) Diferentes átomos distribuídos aleatoriamente.

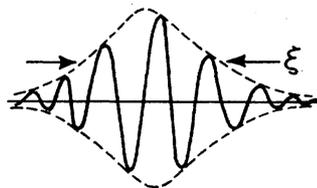


Fonte: Autor, 2011.

No modelo teórico apresentado na seção anterior (teoria de Bloch-Peierls-Morse-Wilson), um sólido é um isolante se cada banda está completamente cheia ou completamente vazia. Neste caso, a Energia de Fermi E_F está entre as bandas de valência e condução, existindo um gap de energia separando as mesmas. Uma vez que funções de onda são funções de Bloch, podemos dizer que estas tem uma “extensão” considerável ao longo do cristal. Em outras palavras, podemos dizer que a função de onda eletrônica nas vizinhanças da E_F correspondem a *estados estendidos*.

Ao lidarmos com o isolante de Anderson, temos estados eletrônicos *localizados*, ou seja, a função de onda pode tornar-se concentrada numa região composta de alguns átomos da rede, com amplitude desprezível no restante do sólido. Este comportamento é ilustrado na figura 2.3, onde o envelope da função de onda decai exponencialmente no espaço $\psi(\mathbf{r}) \sim \exp(r - r_0)/\xi$. O parâmetro ξ , conhecido por comprimento de localização, é usado para caracterizar a função de onda eletrônica.

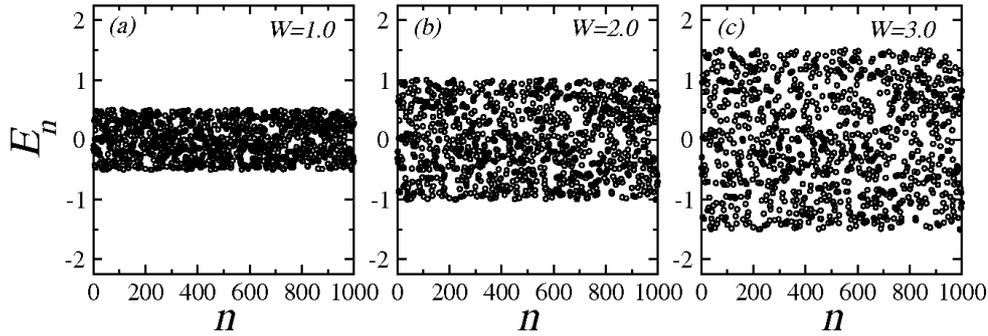
Figura 2.3: Representação da função de onda típica de um estado localizado, com comprimento de localização ξ .



Fonte: P.A. Lee, 1985 (referência [17]).

Para capturar a essência do transporte eletrônico na presença de desordem, Anderson propôs um hamiltoniano contendo somente um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos e um termo de potencial que descreve a energia de cada

Figura 2.4: Amostra de um distribuição de potencial desordenado para uma cadeia de 1000 sítios e largura de desordem (a) $W = 1.0$; (b) $W = 2.0$ e (c) $W = 3.0$.



Fonte: Autor, 2011.

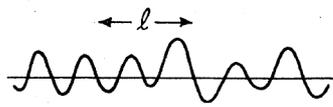
sítio da rede. O hamiltoniano em questão, conhecido como hamiltoniano de Anderson, expresso numa representação de segunda quantização, é dado por:

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (2.5)$$

onde ϵ_i é a energia do sítio i e t_{ij} é chamado de integral de transferência entre os sítios i e j , também conhecido como a amplitude de *hopping*. Os termos c_i^\dagger e c_i são operadores de criação e aniquilação de elétrons no sítio i . Anderson introduziu o efeito de desordem considerando as energias ϵ_i sendo números aleatoriamente distribuídos num intervalo de largura W , sendo este último parâmetro chamado de largura da desordem (ver figura 2.4). É fácil perceber que este tipo de distribuição representa uma desordem composicional, como se o cristal fosse formado por diferentes átomos aleatoriamente distribuídos.

O comportamento da localização da função de onda pode ser entendido como um espalhamento das ondas de Bloch no potencial aleatório. Em seu artigo, Anderson apresenta a localização da função de onda apenas quando o sistema apresenta-se com um *grau de desordem suficientemente alto*. Neste caso, podemos entender como o espalhamento das ondas de Bloch no potencial aleatório causando uma perda da coerência de fase suficiente para a localização da função de onda. Para um grau de desordem fraco, a função de onda eletrônica continua estendida, porém sem coerência de fase sobre o comprimento de escala do livre caminho médio (ver figura 2.5). Para graus de desordem intermediários o sistema apresenta uma transição metal-isolante, ou seja, a função de onda deixa de ser estendida e passa a ser localizada.

Figura 2.5: Representação da função de onda típica de um estado estendido com livre caminho médio l .

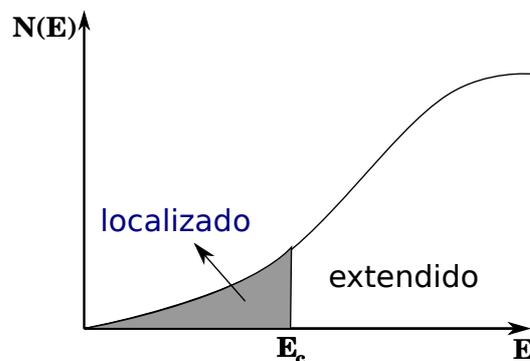


Fonte: P.A. Lee, 1985 (referência [17]).

A transição metal-isolante oriunda da desordem pode ser facilmente percebida ao considerarmos dois limites. No primeiro limite, consideremos que todas as energias ϵ_i são escolhidas com mesmo valor, ou seja, $W = 0$. Como resultado nós obtemos funções de Bloch estendidas por toda a rede. O outro limite, consideremos $t_{ij} = 0$, ou seja, nenhum dos sítios são conectados. É óbvio que não observa-se transporte eletrônico neste caso, o que resulta em autoestados localizados. Desta forma, podemos ver que o modelo de Anderson descreve uma transição metal-isolante que é governada, ao menos parcialmente, pela razão W/t . Em outras palavras, Anderson mostra que, após W/t exceder um valor crítico, os estados da banda de valência são localizados.

Após o resultado de Anderson, o tema localização devido a presença de desordem foi rapidamente e amplamente abordado por diversos autores. Entre os diversos autores da área Sir Nevill Mott⁷ merece destaque por seu empenho e desenvolvimento de vários e importantes estudos[48, 49]. Em um destes trabalhos, Mott, juntamente com Twose, sugeriram que a transição metal-isolante dependia da dimensão do sistema. Isto porque, os seus resultados mostravam que, independente do grau de desordem, todos estados no modelo de Anderson unidimensional são localizados[50]. Embora os autores tenham utilizado o modelo de Kronig-Penney desordenado, seus resultados são corroborados pelos estudos de Borland que considerou uma distribuição aleatória de funções delta[51]. Mott também sugeriu que mesmo para um grau de desordem fraco, existem estados localizados para as energias perto das extremidades de uma banda [52]. Ele propôs o conceito de uma

Figura 2.6: Densidade de estados em uma banda parcialmente localizada, ou “banda de Anderson”. O *mobility edge* E_c separa as regiões de estados localizados (área hachurada) e estados estendidos.



Fonte: Autor, 2011.

energia crítica E_c que separa energeticamente estados localizados de estados estendidos, como representado na figura 2.6. Esta energia crítica conhecida atualmente por *mobility edge*⁸ representa esta energia crítica para a transição de um estado extendido (metálico) para um estado localizado (isolante). Expressando de maneira simplória a condutividade

⁷Sir Nevill Mott (1905-1996): Físico Inglês que ganhou o Prêmio Nobel de Física em 1977 por seu trabalho sobre a estrutura eletrônica de sistemas magnéticos e desordenados, especialmente semicondutores amorfos. O prêmio foi compartilhado com a Philip W. Anderson e J.H. Van Vleck, que realizaram seus estudos sobre as propriedades eletrônicas dos sólidos independentemente.

⁸Termo implantado por Cohen e colaboradores em 1969[53]

em termos de E_c temos:

$$\sigma(E) = 0 \quad (E < E_c) \quad \text{e} \quad \sigma(E) > 0 \quad (E > E_c)$$

Em termos da energia de Fermi E_F , se $E_F > E_c$ o sistema é metálico e a condutividade σ aumenta quando $T \rightarrow 0$. Por outro lado, se $E_F < E_c$ a condutividade $\sigma \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow 0$.

A transição de um região em que $E_F > E_c$ para uma região em que $E_F < E_c$ apresenta várias dificuldades na descrição das propriedades do sistema na vizinhança do “ponto de transição”. A analogia com problemas de transição de fase possibilitaram aplicar alguns métodos da área ao estudo de localização de Anderson. Um destes métodos foi a transformação de escala de fenômenos críticos, método este que foi o pilar principal para um dos mais importantes, se não o mais importante trabalho relacionado ao modelo de Anderson: A teoria de escala da localização.

2.3.2 Teoria de Escala da localização

A busca por um resultado consistente sobre o localiação de Anderson fez com que Thouless estudasse o modelo de Anderson utilizando conceitos de transformação de escala de fenômenos críticos[54, 55, 56]. A idéia de Thouless se baseia no fato de que uma autofunção localizada deve se tornar insensível às condições de contorno à medida que o tamanho da amostra é aumentado para além do seu comprimento de localização, enquanto que o estado estendido seria sempre sensível, independentemente do tamanho da amostra. Desta forma, Thouless propôs uma reformulação do modelo de Anderson[55] utilizando-se dos seguintes conceitos:

- Um sítio atômico i do modelo de Anderson corresponde a um “bloco” do material contendo muitos sítios. Este bloco possui volume L^d , sendo d a dimensão e L o lado do bloco. O sólido é formado por vários destes blocos acoplados uns aos outros.
- As energias características do modelo de Anderson W e t são mapeadas em outras duas grandezas. A largura de desordem W corresponde a $\Delta E \approx W/N$ que representa o espaçamento médio entre os níveis de energia dentro do bloco. O *hopping* t_{ij} corresponde a δE que representa o deslocamento δE causado por mudanças nas condições de contorno na interface do cubo.
- A razão W/t do modelo de Anderson que nos oferece uma medida do grau de desordem é agora mapeado na razão $\Delta E/\delta E$ que possui uma característica de parâmetro de desordem.

Desta forma, o grau de localização da funções de onda está relacionado a sensibilidade dos níveis de energia à variação nas condições de contorno. Esta variação dos níveis de energia devido as condições de contorno é expressa em termos da condutância. Considerando que o elétron realiza um movimento browniano dentro da caixa, podemos escrever

$$t_D = \frac{L^2}{D} \tag{2.6}$$

sendo D a constante de difusão. Através de um elegante argumento eurístico, baseado no princípio da incerteza ($\delta t \delta E \geq \hbar$), podemos exprimir

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D} \quad (2.7)$$

sendo t_D o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos da caixa de lado L . Conhecendo a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão, temos $\sigma = e^2 D n(E)$ (sendo $n(E)$ a densidade de estados média). Combinando esta última com as equações 2.7 e 2.6, temos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}, \quad (2.8)$$

ou seja, podemos escrever δE em função da condutividade σ no limite macroscópico.

Uma vez que podemos escrever a densidade de estados média como função do espaçamento médio entre os níveis

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E} \quad (2.9)$$

reescrevemos a expressão 2.8 como

$$\frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} \quad (2.10)$$

Visto que σL^{d-2} pode ser interpretado como a condutância de cubo d-dimensional de lado L , podemos dizer que $G(L)$ dado por

$$G(L) = \frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2}, \quad (2.11)$$

pode ser visto como a *condutância generalizada* expressa em unidades de e^2/\hbar . Esta última expressão nos fornece uma medida do grau de desordem no sistema, análoga à razão t/W no modelo de Anderson tradicional. Estados estendidos que são sensíveis as mudanças nas condições de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados localizados não são ($\delta E < \Delta E$).

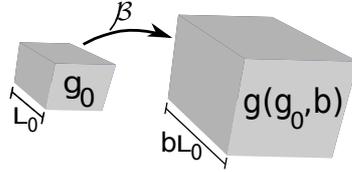
O modelo proposto por Thouless [55] serviu como base para um trabalho consistente sobre a teoria de Anderson: *a teoria de escala da localização* [16]. Apresentado em 1979, o trabalho proposto por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishman, expõe a dependência da transição metal-isolante com a dimensão do sistema. Baseada no modelo de Thouless descrito anteriormente, a teoria de escala da localização define uma condutância generalizada adimensional $g(L)$ dada por

$$g(L) = \frac{G(L)}{e^2/\hbar} = \frac{\hbar}{e^2} G(L) \quad (2.12)$$

Esta condutância generalizada é uma função de escala que será investigada com respeito a sua dependência em relação ao comprimento de escala utilizado. Supondo g_0 como a

condutância generalizada para um sistema composto por caixas acopladas de volume L_0^d , temos $g_0 = g(L_0) = \delta E(L_0)/\Delta E(L_0)$. A teoria de escala assume que, dada a existência

Figura 2.7: Representação gráfica da teoria de escala da condutância generalizada.



Fonte: Autor, 2011.

de uma condutância generalizada g_0 para um escala de comprimento L_0 , pode-se obter uma condutância generalizada g para uma escala maior $L = bL_0$. Nessa nova escala, a condutância generalizada g é completamente determinada pelo valor de g_0 e b , sendo este último um fator de escala.

Se o fator de escala b for tratado como uma transformação contínua, o comportamento de escala de g pode ser determinado pela função

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (2.13)$$

Nesta última equação, podemos perceber que a quantidade $\beta > 0$ reflete o crescimento de g com o crescimento de L , enquanto que $\beta < 0$ reflete o decréscimo de g com o aumento de L . A figura 2.8, proposta no trabalho de Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [16], apresenta o comportamento de $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 . A análise do comportamento qualitativo da função $\beta(g)$, que nos leva ao melhor entendimento da figura 2.8, pode ser determinado tomando os seus limites assintóticos ($g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$) na equação 2.13.

$g \rightarrow \infty$: Para grandes valores de $g(L)$, relativo a um baixo grau de desordem, a condutância generalizada é dada pela teoria macrostópica de Thouless, de maneira que $G(L)$ é dado pela expressão 2.11. A análise da função 2.13 nos revela que:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) \approx d - 2 \quad (2.14)$$

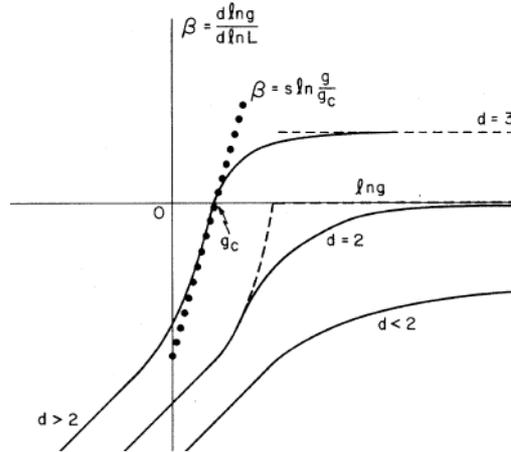
ou seja, como g cresce com o aumento de L (ver expressão 2.11), temos

$$\beta(g \rightarrow \infty) \approx \begin{cases} +1 & \text{para } d = 3 \\ 0 & \text{para } d = 2 \\ -1 & \text{para } d = 1 \end{cases} \quad (2.15)$$

Estes limites podem ser vistos no lado direito da figura 2.8.

$g \rightarrow 0$: Para pequenos valores de $g(L)$, a condutância generalizada apresenta uma dependência exponencial do tipo $g \sim e^{-L/\xi}$. Isto é reflexo do elevado grau de desordem que faz com que os estados eletrônicos sejam localizados. Neste caso, devemos lembrar que a função de onda eletrônica apresenta um decaimento exponencial no espaço $\psi(\mathbf{r}) \sim$

Figura 2.8: Comportamento qualitativo da função de escala $\beta(g)$ em função das dimensões $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala apresentada em [16].



Fonte: E. Abrahams, 1979 (referência [16]).

$\exp(r - r_0)/\xi$, sendo ξ o comprimento de localização (ver página 9). Temos assim um comprimento de localização ξ muito menor ($\xi \ll L$) que o tamanho da amostra. A análise da função 2.13 nos revela que:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) \approx \ln g \quad (2.16)$$

Como a condutância generalizada $g(L)$ diminui com o aumento de L ($g \sim e^{-L/\xi}$), através da última equação vemos que $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende a zero, independente da dimensão.

Observa-se que a figura 2.8 ao apresentar o comportamento de $\beta(g)$, revela a dependência da transição de Anderson com a dimensão do sistema. Embora tenhamos desenvolvido o comportamento qualitativo da função $\beta(g)$, para um determinado grau de desordem, $g(L)$ evolui lentamente e monotonicamente entre as equações 2.14 e 2.16, esboçando as curvas da figura 2.8. Espera-se que $\beta(g)$ seja contínuo visto que esta função descreve a condutância de um sistema finito evoluindo em função da escala. Assumir a monotonicidade garante que a forma da condutância para elevados graus de desordem interpole lentamente ao valor assintótico de grau de desordem fraco.

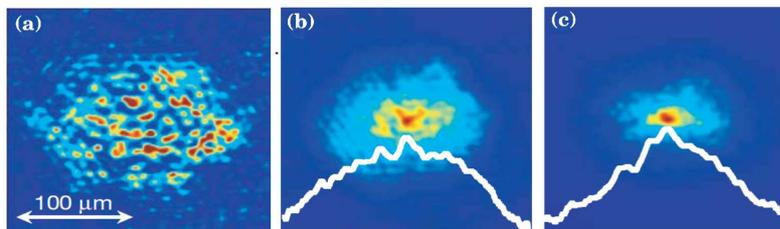
A teoria de escala propõe que o modelo de Anderson para $d \leq 2$, todos os estados sendo localizados independente do grau de desordem do sistema, visto que β é sempre negativo. Isto significa que se conhecemos $g(L_0) = g_0$ para algum L_0 , para todo L nós obteremos $g(L) \sim e^{-L/\xi}$ quando $L \rightarrow \infty$. O resultado encontrado para $d = 1$ concorda com os trabalhos de Mott [50] e Borland [51]. Em $d = 2$, embora tenha sido mostrado que $\beta(g \rightarrow \infty) \approx 0$, todos os estados são localizados. Isto porque, para g grande, a função $\beta|_{2d}$ está tão perto do eixo $\beta = 0$, que g diminui muito lentamente com o aumento L . O comprimento de localização pode exceder em muito as dimensões da amostra analisada em sistemas $2d$ desordenados. Desta forma, a teoria de escala prevê que para um comprimento de escala suficientemente grande, mesmo para graus de desordem pequenos, os estados

eletrônicos em um sistema $2d$ são localizados. Em $d = 3$ a teoria de escala prevê a existência de comportamentos distintos para $\beta(g) < 0$ e $\beta(g) > 0$. Existe um ponto crítico g_c que separa a região em que o sistema comporta-se como um isolante ($\beta < 0$) da região em que o sistema apresenta um caráter metálico ($\beta > 0$). Maiores detalhes sobre o ponto crítico e o comportamento do sistema perto do ponto crítico podem ser encontrados na referência [57].

A teoria de escala foi responsável por deixar evidente alguns fatores importantes da transição metal-isolante proposta por Anderson. De fundamental importância para a física do estado sólido de sistemas amorfos, a localização de Anderson e a teoria de escala proporcionaram o desenvolvimento de inúmeros estudos teóricos e experimentais de transporte eletrônico, que podem ser encontrados sumarizados em artigos de revisão [17, 58, 59] e em livros [60, 61, 62, 63]. Além disso, embora a proposta inicial de Anderson tenha sido elaborada no contexto de localização da função de onda eletrônica, o fenômeno de localização na presença de desordem tem sido observado em diversos meios, como por exemplo:

Ondas eletromagnéticas: Arya e Birman discutiram a propagação de uma onda óptica através de um dielétrico possuindo uma distribuição de partículas metálicas aleatórias no seu interior. Eles mostraram que a localização acontece em virtude da concentração de partículas [64]. Drake e Genack estudaram a difusão óptica através da transmissão de pulsos de picosegundos em uma amostra com esferas de titânio no ar [65]. Seus resultados foram corroborados pelos estudos de Economou e Soukolis, que indicam uma localização óptica em um sistema de esferas de titânio no ar [66]. Mais recentemente, Wiersma e co-autores observaram o fenômeno de localização de Anderson para a luz em experimentos de ópticos através de um experimento realizado em amostras de Arsenieto de Gálio. Seus resultados mostram que o coeficiente de transmissão diminui exponencialmente em relação a espessura de uma amostra [67]. Schwartz e co-autores relataram a observação experimental da localização de Anderson causada por flutuações aleatórias em uma rede fotônica bidimensional (ver figura 2.9). Foi demonstrado que um transporte balístico se torna difuso na presença de desordem, e que a localização de Anderson ocorre para um elevado nível de desordem [68]. Nascimento, Moura e Lyra investigaram vários aspectos

Figura 2.9: Resultados experimentais para a propagação de luz em redes fotônicas desordenadas. A distribuição da intensidade de luz medida experimentalmente para uma rede (a) sem desordem, (b) com 15% de desordem e (c) 45% de desordem.



Fonte: T. Schwartz, 2007 (referência [68]).

de escala do espectro de transmissão em meios dielétricos de multicamadas com desordem posicional. Seus resultados demonstram que a desordem induz dois aspectos opostos sobre o comportamento de transmissão: para frequências em que o comprimento óptico de

cada camada é um múltiplo inteiro de meio comprimento de onda, o principal efeito da desordem é promover a localização exponencial dos modos, exceto na ressonância; Já na região de frequências proibidas, conhecido como *band gap* fotônico, a desordem promove o aparecimento de estados que promovem uma pequena transmissão, mas finita em sistemas finitos. [69]. Outros trabalhos na área podem ser encontrados no artigo de revisão [70].

Ondas acústicas: Alguns estudos foram direcionados a propagação do terceiro som (“*third sound*”) sobre substratos desordenados de superfluido de ${}^4\text{He}$. Entre eles, Condat e Kirkpatrick, através de estudos teóricos, propuseram um sistema experimental para a observação da localização de ondas acústicas em sistemas 1d [71], enquanto que Cohen e Machta apresentaram análises teóricas do modelo para sistemas 2d [72]. Recentemente, F. Shahbazi e colaboradores estudaram a localização de ondas acústicas em meios altamente heterogêneos, e formularam um método de teórico para investigar o problema em meios que são caracterizados por uma ampla distribuição de constantes elásticas [73]. Os autores demonstram que há uma transição, induzida pela desordem, para o regime localizado, para qualquer dimensão. Outros trabalhos na área, tanto teóricos quanto experimentais, podem ser encontrados no artigo de revisão [74];

Ondas de Matéria (*matter waves*): Estudos recentes tem demonstrado a criação de estruturas periódicas em 1d, 2d e 3d nas quais átomos podem ser aprisionados, com a possibilidade de manipulação da rede periódica. Condensados de Bose-Einstein dentro destes potenciais periódicos induzidos por luz, conhecidos como redes ópticas, compartilham muitas características com elétrons em sólidos [32]. Do ponto de vista experimental, a manipulação de gases ultra frios nestas redes ópticas tem se mostrado muito importantes, com a perspectiva de que tais sistemas sejam utilizados como simuladores quânticos para responder a algumas perguntas em aberto da matéria condensada [75]. Dentro do contexto de sistemas com desordem, Damisky e co-autores estudaram um sistema constituído de um gás de Bose ultra frio em redes ópticas. Seus resultados revelam que o aparecimento de uma pequena perturbação do potencial da rede pode resultar em uma transição de um regime de superfluido para um regime localizado. Esta transição ocorre em escalas de tempo experimentalmente viáveis e pode ser facilmente controlada, permitindo uma análise detalhada de transições induzidas por desordem [76]. Do ponto de vista experimental, estudos recentes revelaram a observação da localização de Anderson em condensados de Bose-Einstein em redes ópticas [77, 78]. Outros trabalhos sobre redes ópticas e localização de Anderson em ondas de matéria podem ser encontrados nos artigos de revisão [32, 75]

Excitações coletivas: O movimento vibracional coletivo de cadeias harmônicas desordenadas unidimensionais também podem ser mapeados no modelo de Anderson [79]. A maioria dos modos normais de vibração estão localizados. Entretanto, existem alguns modos delocalizados de baixa frequência, cujo número é da ordem de \sqrt{N} , caso em que as cadeias desordenadas se comportam como um sistema livre de desordem [79, 80]. Também é possível mapear o Hamiltoniano de Heisenberg associado a excitações de um mágnon através de modelo eletrônico [81]. Em geral, demonstra-se que os estados de energia finita são exponencialmente localizados em qualquer grau de desordem. No entanto, o comprimento de localização típico cresce à medida que se aproxima do limite inferior da banda [82, 83, 84]. Além disso, foi demonstrado que uma excitação de spin inicialmente

localizada pode apresentar um comportamento super-difusivo na presença de desordem [84].

Podemos ver que, embora contenha várias simplificações, o modelo de Anderson é considerado até hoje a estratégia mais eficiente para estudar os efeitos da desordem sobre propriedades de transporte eletrônico. Muitos dos estudos sobre localização de Anderson tem sido feitos em termos de procedimentos de escala, revelando resultados que concordam com a teoria de escala: no modelo de Anderson, para $d = 1$ e $d = 2$ não existe transição metal-isolante, enquanto que em $d = 3$ há um ponto crítico (*mobility edge*) para a transição metal-isolante. Entretanto, a presença de determinados “ingredientes” no modelo de Anderson dá origem a resultados não previstos na teoria de escala. Veremos a seguir um pouco mais sobre estes modelos.

2.3.3 Exceções da teoria de escala: existência de aperiodicidade e correlação

A teoria de escala da localização apresentada anteriormente revela o comportamento isolante em sistemas $1d$ e $2d$ para qualquer quantidade de desordem e a possibilidade de um comportamento metálico em sistemas $3d$, ou seja, uma transição metal-isolante. Entretanto, uma série de trabalhos têm sido apresentados nas últimas décadas, nos quais a distribuição de desordem é feita de forma a respeitar sequências pseudo-aleatórias ou apresentando correlações. A presença destes ingredientes na distribuição da desordem são responsáveis por um comportamento não previsto pela teoria de escala para o modelo de Anderson.

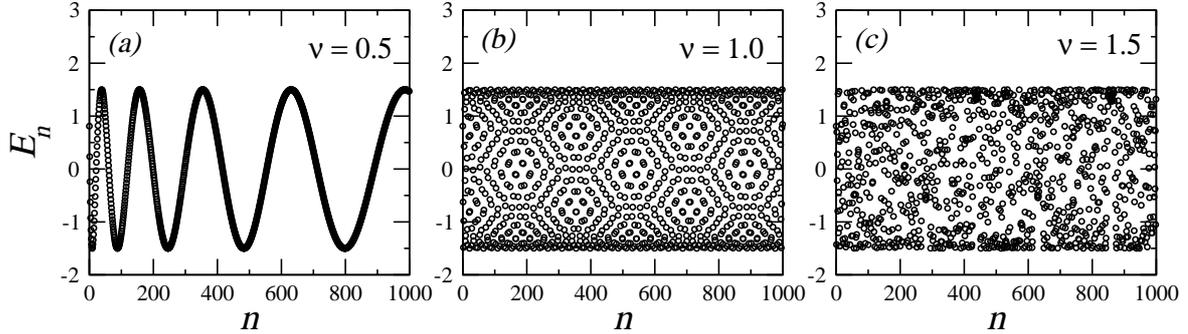
Aperiodicidade

Ao fim dos anos 70 e início dos anos 80 foram apresentados os primeiros modelos de baixa dimensionalidade que revelaram uma transição metal-isolante. Estes modelos apresentam potenciais incomensuráveis, tendo como uma das suas características o comportamento intermediário entre os casos periódico e aleatório [85, 86, 87, 88]. M. Ya. Azbel, utilizando o modelo de Kromig-Penney, demonstrou que os auto-estados podem ser estendidos e localizados, separados por *mobility edges*. Foi estabelecida também uma relação entre o modelo estudado e as propriedades eletrônicas de estruturas lineares de potenciais com períodos incomensuráveis conhecidas na época [85]. J.B.Sokoloff, motivado pelo trabalho de Azbel, estudou a localização eletrônica num modelo tight-binding contendo um potencial com período incomensurável de modulação periódica [86]. Em seu modelo, a equação de Schrödinger é apresentada como

$$f_{n+1} + f_{n-1} + V_0(\cos qn)f_n = Ef_n \quad (2.17)$$

sendo f_n o coeficiente de expansão para a função *tight-binding* [$\psi(x) = \sum_n f_n \phi(x - na)$], enquanto ϕ representa um orbital atômico. As demais grandezas estão em unidades de amplitude de *hopping*. A incomensurabilidade se dá ao assumirmos q como irracional. Neste trabalho foi mostrado que a teoria apresentada por Azbel prevê a existência de *mobility edges* próximos de $\pm(2 - V_0)$. O autor apresentou a existência de uma transição

Figura 2.10: Potencial aperiódico calculado a partir da equação 2.18. Os parâmetros característicos do potencial apresentam os seguintes valores: $V = 1.5$, $\pi\alpha = 1$ e (a) $\nu = 0.5$; (b) $\nu = 1.0$; (c) $\nu = 1.5$.



Fonte: Autor, 2011.

metal-isolante em uma dimensão para um valor crítico V_0 . Motivados pelo modelo estudado por Sokoloff, Soukoulis e Economou investigaram a natureza dos auto-estados em cristais unidimensionais, sendo que a distribuição do potencial para os sítios era incomensurável [87]. Os autores utilizaram três diferentes métodos para determinar a natureza dos auto-estados e concluíram que a presença de incomensurabilidade produz, em geral, *mobility edges* em sistemas unidimensionais.

Griniasty and Fishman investigaram o comprimento de localização do modelo tight-binding $V_n f_n + f_{n+1} + f_{n-1} = E u_n$ [89]. Em seu modelo, a distribuição do potencial V_n é regido pela equação

$$V_n = V \cos k|n|^\nu \quad (2.18)$$

tendo $k = \pi\alpha$, α é um número irracional para que V_n seja um potencial incomensurável. Caso α seja um racional e o parâmetro ν assumo o valor $\nu = 1$, V_n tomará forma de um potencial periódico. O parâmetro V funciona como uma amplitude da distribuição de potenciais, onde $2V$ representa a largura de desordem. Exemplos de distribuições de potencial regido pela equação 2.18 podem ser vistos na figura 2.10. Através de cálculos numéricos e usando teoria de perturbação para $V \ll 1$, os autores observaram uma similaridade cada vez maior entre o potencial da eq.(2.18) e potenciais aleatórios, à medida que aumenta-se o valor de ν . Constatou-se a existência de estados estendidos para $V < 2$, estados localizados para $V > 2$. Além disso, foi visto que para $\nu \geq 2$, todos os estados eram localizados, enquanto que o caso $0 < \nu \leq 1$ existiam estados estendidos. Para $1 < \nu < 2$ encontrou-se uma discordância entre os resultados previstos pelo método de teoria de perturbação e os resultados numéricos, tendo o autor sugerido uma maior investigação do problema.

S. Das Sarma e colaboradores[90], assim como Griniasty e colaboradores [89] e Thouless [91], investigaram a localização de um modelo *tight-binding* unidimensional, tendo o potencial regido pela equação 2.18. Os resultados apresentaram a existência de estados estendidos e localizados dependente da largura de desordem e dos valores de ν .

- Quando $0 < \nu < 1$ e $V < 2$: Haverá estados estendidos na faixa $-2+V < E < 2-V$

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

- Quando $0 < \nu < 1$ e $V > 2$: Todos os estados são localizados.
- Quando $\nu = 1$ e $V < 2$: Todos os estados estendidos
- Quando $\nu = 1$ e $V > 2$: Todos os estados são localizados.
- Quando $1 < \nu < 2$: Todos os estados são localizados, mas o expoente de Lyapunov se aproxima de zero no centro da banda.
- Quando $\nu > 2$: O sistema se comporta como um modelo de Anderson unidimensional e todos os estados são exponencialmente localizados.

Em outro trabalho, S. Das Sarma e colaboradores desenvolveram uma técnica semi-clássica assintótica para calcular, no limite termodinâmico, a densidade de estados e o expoente de Lyapunov para o modelo *tight binding* unidimensional com potencial *on-site* regido pela equação 2.18 [92]. Além disso, realizaram estudos numéricos envolvendo a diagonalização direta e cálculos recursivos de matriz de transferência para compreender as propriedades de localização do modelo. Os resultados analíticos estão exatamente de acordo com os resultados numéricos, diferentemente da técnica utilizada por Griniasty and Fishman [89], que possui limitações. Neste último foi apresentado a existência de uma transição metal-isolante no modelo uni-dimensional para $V < 2$ e $\nu < 1$, com os *mobility edges* fixos para energias $E_c = \pm|2 - V|$.

Assim como o modelo de Anderson, distribuições determinísticas tem sido abordadas em diversos estudos. Como exemplo, temos o trabalho de Costa e Moura, que estudaram numericamente a propagação de ondas acústicas em um sistema unidimensional com uma distribuição elasticidade pseudo-aleatórios, similar à equação 2.10. Seus resultados indicam a presença de ondas acústicas estendidas, com uma frequência diferente de zero, para um grau aperiodicidade suficiente [93]. Xiaoming Cai e colaboradores estudaram a transição da fase superfluida para a fase vítrea de Bose (*Bose-glass* ou isolante de Anderson) para um gás de Bose fortemente repulsivo, em uma rede óptica aperiódica $1d$. Seus resultados demonstram a existência de uma transição de fase superfluido para isolante [94]. Nascimento, Moura e Lyra investigaram a transmissão de ondas eletromagnéticas planas através de uma estrutura $1d$ de multicamadas de dielétricos que apresentam seqüências aperiódicas de índices de refração [95]. A aperiodicidade é introduzida ao considerar a seqüência de índices de refração seguindo uma função senoidal cuja fase ϕ varia como uma lei de potência do índice da camada, $\phi \propto i^\nu$. Seus resultados revelam que no regime pseudo-aleatório ($\nu > 1$), a localização de Anderson dos modos eletromagnéticos leva a uma grande lacuna no espectro de transmissão, com bandas de transmissão estreitas centradas na ressonância de Bragg. No regime de $\nu < 1$, existe uma dependência não monotônica da transmissão espectral média com o expoente da aperiodicidade α . Em um sistema ferromagnético quântico unidimensional com uma distribuição de acoplamentos aperiódica, Moura apresentou a existência de uma fase de ondas de spin estendidas na região de baixa energia [96].

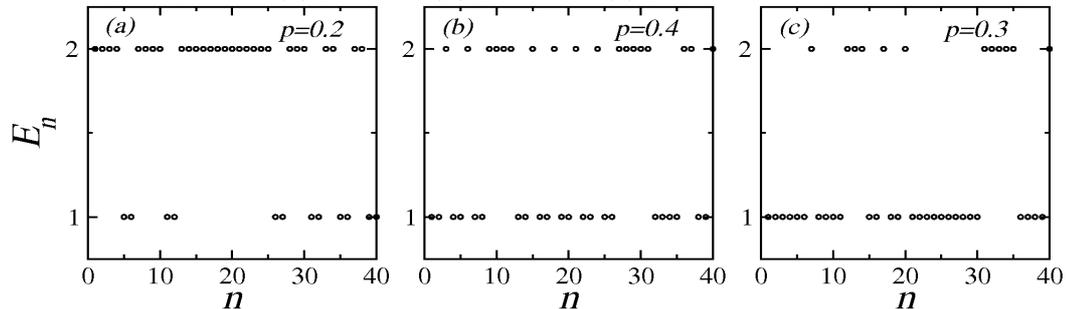
De maneira geral, os estudos relacionados ao modelo de Anderson que possuem uma distribuição aperiódica, apresentam características entre o modelo periódico de Bloch e

o modelo aleatório de Anderson. Embora a teoria de escala tenha previsto uma transição metal-isolante (ou estendido-localizado para sistemas análogos) em $3d$, os trabalhos apresentados anteriormente e inúmeros outros revelam que algumas distribuições determinísticas são responsáveis por atribuir ao modelo uma transição não prevista pela teoria de escala. Além disso, do ponto de vista numérico, é importante ressaltar que se trata de uma distribuição determinística, não sendo necessários cálculos de valores médios (sobre amostras) das grandezas investigadas. Isto quer dizer que, do ponto de vista experimental, todas as amostras devem apresentar a mesma distribuição de potenciais (caso eletrônico), elasticidade (caso de ondas acústicas), índices de refração (caso de onda em meios de multicamadas), não sendo necessárias medidas em diversas amostras.

Correlações

Como foi brevemente falado no início desta seção, a presença de correlações na distribuição da desordem também é responsável por comportamentos não previstos no modelo de Anderson de baixa dimensionalidade. Flores mostrou que o Hamiltoniano de Anderson unidimensional, tendo a presença de desordem na distribuição do potencial e da amplitude de *hopping*, pode apresentar uma energia crítica (E_c), onde a transmissão (delocalização) da função de onda ocorre quando são introduzidas correlações entre as energias dos sítios e os termos de *hopping* [97]. Dunlap, Wu e Phillip apresentaram um estudo sobre uma cadeia composta por uma liga binária, conhecida na literatura como modelo do dímero aleatório (*random-dimer model*) [98]. Nesta liga as energias dos sítios do sistema podem assumir os valores de ϵ_A e ϵ_B , com probabilidades p e $1 - p$ respectivamente. Além disso, os sítios com energia ϵ_A sempre aparecem aos pares (ver representação na figura 2.11). Considerando uma distribuição com o maior grau de desordem ($p = 1/2$) e t a amplitude

Figura 2.11: Distribuição de potenciais em uma rede de 40 sítios com desordem diagonal do tipo dímero aleatório. As energias dos sítios do sistema podem assumir os valores de $\epsilon_A = 1.0$ e $\epsilon_B = 2.0$, com probabilidades p e $1 - p$ respectivamente. Os sítios com energia ϵ_A sempre aparecem aos pares, sendo (a) $p = 0.2$, (b) $p = 0.4$ e (c) $p = 0.6$.



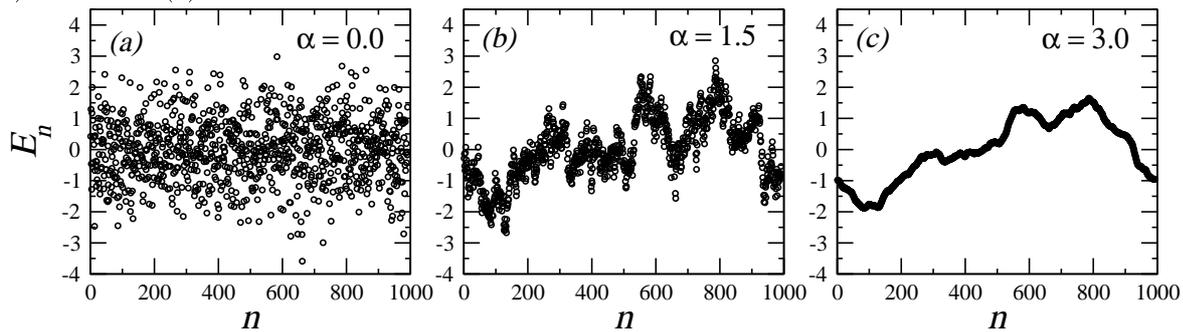
Fonte: Autor, 2011.

de *hopping*, os autores demonstraram a existência de um transporte superdifusivo para $-2t < \epsilon_A - \epsilon_B < 2t$, difusivo para $\epsilon_A - \epsilon_B = \pm 2t$ e localizado para outros valores. Os resultados apresentados por Dunlap, Wu e Phillips foram corroborados por Bovier [99]. Além disso, Wu e Phillips apresentaram o modelo de dímeros aleatórios com desordem fora da diagonal (desordem no termo de *hopping*), relatando que este modelo é capaz de

explicar a transição metal-isolante da polianilina ⁹ [100]. Sánchez, Maciá e Domínguez-Adame também observaram uma supressão da localização de Anderson ao considerar impurezas do tipo dímero no modelo de Kronig-Penney [101]. Estudos experimentais das propriedades eletrônicas de super-redes de GaAs-AlGaAs com desordem correlacionada apresentam evidências que as correlações espaciais inibem a localização de estados em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade [102, 103]

Todos os trabalhos descritos anteriormente relatam que a existência de correlações de curto-alcance, na distribuição da desordem induz o aparecimento de estados estendidos. Entretanto, no limite termodinâmico, a densidade de estados revela a ausência de *mobility edges* separando estados localizados de estados estendidos. Por outro lado, *mobility edges* podem surgir em modelos de baixa dimensionalidade ao introduzir correlações de longo-alcance na distribuição da desordem [104, 105]. Moura e Lyra introduziram uma correlação de longo alcance nos elementos da diagonal do Hamiltoniano de Anderson $1d$, representando uma desordem somente nos potenciais dos sítios da cadeia [104]. Diferentemente do modelo de Anderson usual, que exibe valores para os termos

Figura 2.12: Potencial com desordem correlacionada de longo alcance, baseado na distribuição utilizada na referência [104]. Foi considerado uma cadeia de 1000 sítios e parâmetros (a) $\alpha = 0.0$; (b) $\alpha = 1.5$ e (c) $\alpha = 3.0$.

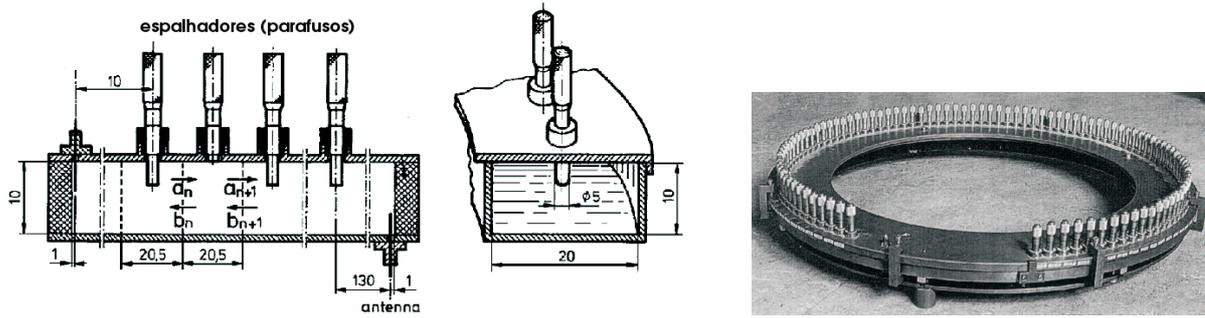


Fonte: Autor, 2011.

da diagonal não correlacionados com um espectro tipo ruído branco ($S(k) \propto k^0$), os autores consideraram as energias *on-site* sendo regidas por uma sequência que descreve o traço de um movimento Browniano fracionário, com uma densidade espectral especificada ($S(k) \propto 1/k^\alpha$). Este modelo apresenta uma fase de estados eletrônicos estendidos para $\alpha > 2$, diferente dos resultados anteriores para correlações de curto alcance, que apresentavam estados estendidos para determinadas energias ressonantes. Izrailev e Krokhin apresentaram outro modelo com correlações de longo alcance no termo diagonal do Hamiltoniano de Anderson, também apresentando uma fase de estados estendidos [105]. Os resultados apresentados por este último foram corroborados por Kuhl e colaboradores [106]. Os autores, explorando a analogia entre a partícula quântica e a onda eletromagnética já demonstrada anteriormente [107], demonstraram a existência de *mobility edge* em $1d$ utilizando um guia de onda retangular. Seu experimento consiste em analisar a propagação de luz através de arranjos periódicos de espalhadores. Os autores utilizaram

⁹Polianilina é um polímero condutor da família dos polímeros flexíveis.

Figura 2.13: Guia de onda utilizada por Kuhl e Stöckman. Todas as dimensões estão em milímetros.



Fonte: U. Kuhl, 1998 (referência [107]).

100 espalhadores cilíndricos, de raio $r = 2.5\text{mm}$ e distantes de $d = 20.5\text{mm}$, introduzidos no guia de onda de maneira que as profundidades podiam variar, funcionando como parafusos (ver figura 2.13).

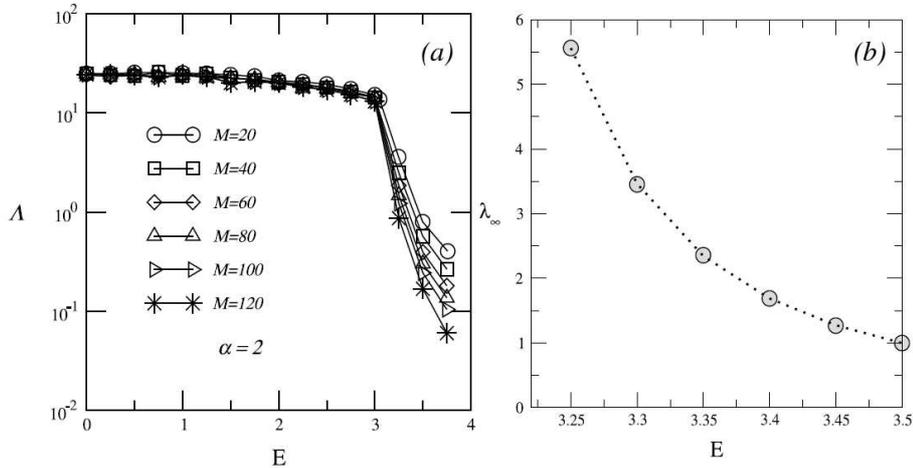
Estudos realizados posteriormente estabeleceram a afirmativa que correlações de longo alcance podem realmente induzir uma transição metal-isolante em sistemas de baixa dimensionalidade. Como exemplo, temos o trabalho de Carpena e colaboradores que apresentaram estudos numéricos utilizando um modelo unidimensional tight-binding com correlações de longo alcance. Com correlações de longo alcance introduzidas em sólidos binários desordenados, observou-se que no limite termodinâmico o sistema pode se comportar como um condutor para uma determinada faixa de energia [108]. Costa e Moura demonstraram que a propagação de ondas acústicas em sistemas de baixa dimensionalidade apresentam uma fase de ondas acústicas estendidas para um meio com uma distribuição de elasticidade com correlações de longo alcance [109].

Dentro deste cenário, estudos preliminares sobre a presença de correlação de longo alcance na distribuição da desordem nos direcionaram a investigação de um modelo de um elétron em uma rede quadrada $2D$. Neste modelo, os termos diagonais foram tomados como energia de referência ($\epsilon_{n,m} = 0$) e os termos de *hopping* apresentando uma desordem. Os termos de *hopping* ao longo da direção y eram determinados por uma superposição de um termo aleatório não correlacionado e um termo desordenado com correlações de longo alcance, enquanto que os termos de *hopping* ao longo da direção x foram tomados como unitários. A distribuição correlacionada de longo alcance introduzida ao longo da direção y foi determinada segundo uma densidade espectral com um comportamento tipo lei de potência $1/k^\alpha$ [104], de maneira que

$$t_y = \tanh(\nu_y + \rho_y) + \langle t_y \rangle \quad (2.19)$$

sendo $\nu_y = \zeta(\alpha) \sum_{k=1}^{L/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos(\frac{2\pi ky}{L} + \phi_k)$, onde ϕ_k são $L/2$ fases aleatoriamente distribuídas no intervalo $[0, 2\pi]$, $\zeta(\alpha)$ é a constante de normalização onde escolhemos ter uma variância unitária, $\langle \nu_y \rangle = 0$. ρ_y é descrito por L números aleatórios independentes distribuídos uniformemente no intervalo $[-W/2, W/2]$, sendo $\langle t_y \rangle = 2$ para evitar termos de hopping negativos. Através do método da matriz de transferência vemos que o sistema apresenta uma transição metal isolante pouco convencional, tipo Kosterlitz-Thouless (ver

Figura 2.14: (a) Comprimento de localização reescalado $\Lambda = \lambda(E)/M$ como função da energia para $\alpha = 2$ e $M = 20, \dots, 120$. Observa-se o colapso das curvas para $E < E_c \approx 3$, caracterizando uma transição metal isolante em $E = E_c$. (b) Fit do comprimento de localização extrapolado apresenta $\lambda_\infty \propto \exp(C/\sqrt{E - E_c})$, com $E_c = 3.00(5)$. O rápido decaimento do comprimento de localização (observe escala do eixo E) quando desloca-se sutilmente do ponto de transição para o regime isolante é típico de uma transição Kosterlitz-Thouless.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [110]).

figura 2.14). O rápido decaimento do comprimento de localização (observe escala do eixo E da figura 2.14a) quando desloca-se sutilmente do ponto de transição para o regime isolante é típico de uma transição Kosterlitz-Thouless. Isto ocorre quando a distribuição apresenta um expoente de correlação $\alpha > 1$. Este resultado apresenta um novo fator, contrastando com os resultados exibidos por meios desordenados 2D com desordem não correlacionada, que não apresentam uma transição isolante-metal para qualquer quantidade de desordem. Os resultados deste modelo foram publicados na revista *Physics Letters A* (referência [110]), como pode ser visto no anexo A.

Todos os estudos apresentados nesta seção até o presente momento foram direcionados a transição estendido-localizado (conhecida como transição metal-isolante para sistemas de transporte eletrônico) induzida pela desordem. Embora a desordem apresente um papel importante nas propriedades de transporte de sistemas eletrônicos, ela não é o único fator capaz de dar origem a uma transição metal-isolante. A interação elétron-elétron, desprezada no modelo de Anderson e nos modelos vistos anteriormente nesta seção, apresenta aspectos relevantes sobre as propriedades de transporte eletrônico [3, 4, 46, 47]. Veremos a seguir as principais características da presença da interação elétron-elétron.

2.3.4 Interação elétron-elétron e o isolante de Mott

Vimos anteriormente que a distinção básica entre os metais e os isolantes foi proposto e criado nos primeiros anos da mecânica quântica (ver seção 2.2). Embora a representação da estrutura de bandas tenha apresentado explicações com uma grande satisfatoriedade para vários fenômenos, inclusive a distinção entre isolantes e condutores, alguns relatos não

concordam com as previsões da teoria de bandas. Por exemplo, embora seja previsto um comportamento metálico para amostras de óxidos de metais de transição (como óxido de níquel NiO e óxido cuproso Cu_2O), observou-se experimentalmente um comportamento isolante ao estudar-se experimentalmente a condutividade destas substâncias [2].

A análise do modelo de Bloch nos leva a perceber que uma das simplificações existentes no modelo é a ausência de interação elétron-elétron. Por este lado, visto que as propriedades de condução de um material estão associadas ao transporte de cargas elétricas e, em geral, o número de elétrons em um sólido é da ordem do número de Avogadro, é razoável pensar na existência de interação elétron-elétron quando se estuda as propriedades de condução de um dado sistema. Diante desta consideração, o comportamento não previsto pela teoria de bandas para óxidos de níquel NiO e óxido cuproso Cu_2O [2] motivaram os primeiros estudos direcionados a interação entre elétrons [1]. Neste último trabalho, Mott e Peierls atribuíram o comportamento isolante dos óxidos de metais de transição citados anteriormente a forte interação coulombiana entre os elétrons. Alguns anos depois, em 1949, N. F. Mott propôs um modelo capaz de explicar os resultados experimentais obtidos para óxidos de metais de transição [3]. Nestes compostos, a formação de um gap de energia impedindo a condução pode ser entendida como uma competição entre o potencial Coulombiano U entre os elétrons na camada $3d$ e o *hopping* entre os átomos vizinhos.

Isolante de Mott e o modelo de Hubbard

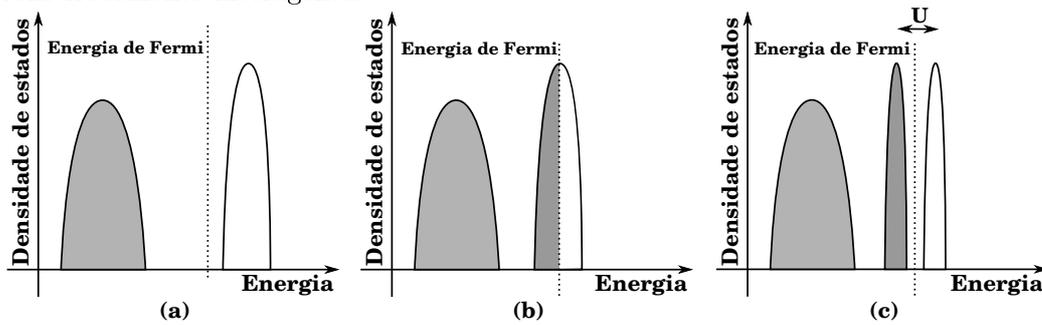
Inicialmente, o principal esforço foi compreender como sistemas com bandas parcialmente preenchidas poderiam ser isolantes. No modelo de bandas apresentado na seção 2.2, a distinção entre um sistema metálico ou isolante, à temperatura zero, era determinada apenas pelo preenchimento de sua estrutura eletrônica. Para o caso de isolantes, a banda de valência é totalmente preenchida (ver figura 2.15a), enquanto que os metais apresentam uma banda parcialmente preenchida (ver figura 2.15b). Em termos do nível de Fermi, num isolante este nível estaria localizado em um *gap*, enquanto que num metal estaria localizado interceptando a banda. Embora alguns óxidos de metais de transição apresentem uma banda d parcialmente ocupada, o seu caráter isolante é explicado devido à interação eletrônica. Ao incluí-la, a banda que estaria parcialmente preenchida no modelo de elétrons não interagentes, é separada em duas sub-bandas (ver figura 2.15c). Agora o nível de Fermi está localizado em um *gap*, o que resulta em um caráter isolante.

A fase isolante em muitos sistemas é atribuída as interações elétron-elétron e tem sido fundamentais para a investigação e entendimento de vários estudos relacionados a transporte eletrônico. Esta fase isolante atribuída a interação elétron-elétron é conhecida de *isolante de Mott*. No isolante de Mott, a energia de interação Coulombiana entre os elétrons é um parâmetro que controla o comportamento do sistema como isolante ou condutor. O isolante de Mott pode ser descrito de maneira que conecte com o quadro de *gaps* de energia apresentado na figura 2.15. Considere uma rede com poucos elétrons e pense na energia necessária para adicionar um elétron a esta rede. Como a probabilidade de encontrar um outro elétron é pequena, este custo energético não envolve uma repulsão coulombiana. Entretanto, quando tivermos a banda semi-preenchida (um elétron por

sítio da rede), o custo de adicionarmos um elétron deve ser aumentado de U , já que inevitavelmente um elétron adicionado deve ficar em um sítio que já possui outro elétron. Isto explica a *gap* de Mott apresentado na figura 2.15c.

A reflexão do comportamento isolante devido a existência de interação elétron-elétron pode ser feita, em poucas palavras, também da seguinte maneira. Consideremos um modelo em que tratamos um elétron itinerante numa rede, tendo 1 elétron para cada sítio da rede (conhecido na literatura de modelo *half-filling*). O elétron ao se mover para um determinado sítio, poderá encontrar um outro elétron no mesmo sítio. Existindo dois elétrons num mesmo átomo, observa-se uma repulsão Coulombiana entre eles. Assim, se o custo energético desta dupla ocupação (energia da repulsão Coulombiana) for grande o suficiente para inibir a propagação do elétron, o sistema apresenta um comportamento isolante. Entendemos assim a transição metal-isolante devido a interação entre elétrons, também conhecida como *transição de Mott*[3, 47].

Figura 2.15: Representação gráfica da densidade de estados para modelo de elétrons não interagentes para um sistema (a) isolante e (b) condutor. (c) Densidade de estados para o modelo de elétrons fracamente interagentes.



Fonte: Autor, 2011.

Podemos ver que o modelo de Mott trata de uma competição entre termo cinético do elétron (*hopping*) e o termo de interação Coulombiana (interação elétron-elétron). O modelo de Mott deu origem ao hamiltoniano

$$H = -t \sum_{i,j} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (2.20)$$

proposto por J. Hubbard [111, 112, 113]. O trabalho de Hubbard consiste em elétrons em uma rede, com *hopping* t do sítio j para o sítio vizinho i , com um custo energético local U quando dois dos elétrons ocupam um mesmo sítio. Neste modelo, i e j são sítios da rede, $c_{i\uparrow}^\dagger$ é o operador criação de um elétron com *spin up* para o sítio i , $c_{j\downarrow}$ é o operador aniquilação de um elétron com *spin down* no sítio j .

Neste modelo vemos duas escalas de energia importantes: a interação coulombiana *on-site* U e a largura da banda $W = 2zt$, sendo z o número de primeiros vizinhos. O comportamento do sistema pode apresentar comportamentos bem distintos em função da razão W/U . Se esta razão é muito grande, o modelo de elétrons independentes explica razoavelmente bem o comportamento metálico do sistema. O outro limite, em que $W \ll U$, o comportamento do sistema é dominado pelas correlações eletrônicas que inibem o

hopping eletrônico. Embora aparentemente simples, este modelo é capaz de descrever a transição metal-isolante proposto por Mott.

A transição metal-isolante em função da interação elétron-elétron ainda hoje desperta muito interesse [46]. Experimentalmente, as propriedades incomuns do estado metálico nas proximidades da transição metal-isolante tem sido mais extensivamente estudadas em sistemas d-eletronicos [46]. Além disso, sistemas de elétrons interagentes também são utilizados no estudo de ferromagnetismo de metais de transição e supercondutividade a altas temperaturas [46, 114, 115]. Experimentos em baixas temperaturas em redes ópticas tem mostrado importantes fatores nos estudos de sistemas interagentes. Este fato foi salientado por Jaksch e colaboradores, que sugeriram que a dinâmica de átomos bosônicos em redes ópticas são bem descritos por um hamiltoniano de Hubbard [116]. A razão entre a interação U *on-site* e o termo de *hopping* podem ser controladas por parâmetros do laser: com o aumento da profundidade do potencial óptico, a função de onda atômica torna-se mais localizada e a interação *on site* aumenta, enquanto que o termo de hopping é reduzido [116]. As idéias propostas levaram à observação experimental da transição de uma fase de superfluido para uma isolante de Mott para bósons, usando um condensado de Bose-Einstein em uma rede óptica tridimensional [117, 118].

Embora o modelo de Hubbard pareça simples, a obtenção de sua solução para o estudo das propriedades físicas do sistema não é trivial. Algumas das dificuldades encontradas tem origem na natureza não perturbativa do problema, uma vez que, em geral, o termo de interação não é pequeno suficiente para ser um parâmetro na expansão perturbativa. Outras dificuldades são devido o crescimento exponencial do esforço computacional para a técnica de diagonalização exata, uma vez que o número de configurações eletrônicas cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Apenas em uma dimensão são encontradas soluções exatas para o problema com interação elétron-elétron em sistemas de muitos corpos [5, 6, 7, 8, 9]. Dentro deste contexto, um modelo baseado em apenas duas partículas interagentes [10] tem sido muito explorado por apresentar aspectos físicos relevantes que auxiliam o entendimento das propriedades de sistemas com partículas interagentes de densidade finita, principalmente no que diz respeito a sistemas de elétrons interagentes na presença de desordem [119, 120, 121, 122].

2.3.5 Duas partículas interagentes

Como vimos anteriormente, sistemas que apresentam interação elétron-elétron relevante não são bem descritos pelo modelo de bandas criado para elétrons não interagentes. A busca de entendimento em anéis mesoscópicos foram direcionados à coexistência de interação elétron-elétron e desordem [119, 120, 121, 122]. D. L. Shepelyansk, em 1994, propôs um modelo de duas partículas que apresentava um termo de interação *on-site* de Hubbard em um potencial desordenado [10]. Seus estudos mostram que a influência da interação é pequena sempre que as partículas estejam suficientemente distantes, quando comparadas ao comprimento de localização de uma única partícula. Entretanto, quando as duas partículas estão separadas por uma distância próxima ao comprimento de localização de uma partícula, independentemente do sinal da interação, existe a possibilidade de propagação das duas partículas movendo-se coerentemente. Seu comprimento de localiza-

ção ξ_2 é muito maior que o comprimento de localização de uma partícula ξ_1 , obedecendo uma lei de escala

$$\xi_2 \propto U^2 \xi_1^2 \quad (2.21)$$

Embora seja um modelo simplificado, pois se trata de um problema de duas partículas, seus resultados resgatam efeitos físicos importantes contidos em problemas de muitas partículas [119, 120, 121, 122].

A proposta de Shepelyansk motivou uma série de estudos. Os primeiros estudos foram direcionados à confirmação do enfraquecimento da localização de Anderson e refinamento da expressão 2.21. Vários destes estudos confirmaram o fenômeno [123, 124, 125, 126, 127, 128, 129]. Entretanto, para alguns deles, a relação entre o comprimento de localização de uma partícula (ξ_1) e o comprimento de localização de duas partículas (ξ_2) revelam valores diferentes do apresentado na equação 2.21 [126, 127, 128, 129]. Maiores detalhes podem ser encontrados na referência [62].

Posteriormente, a influência da interação sobre as propriedades de propagação de dois elétrons interagentes com spins opostos em cadeias cuja distribuição de potenciais é determinística também foi investigada [130]. Através da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo, foi apresentado que distribuições de potenciais tipo Fibonacci e Thue-Morse apresentam propagação super-difusiva, reforçada pela interação. Outro estudo considerou duas partículas interagentes em uma estrutura periódica unidimensional sujeita a um campo magnético [131]. Foi mostrado que a localização forte induzida pelo campo magnético é destruída em virtude da interação entre as partículas.

Mais recentemente, alguns estudos em sistemas de muitos corpos foram direcionados aos efeitos da coexistência de desordem e as interações repulsivas. Os trabalhos tem revelado que o efeito descrito por Shepelyansk para sistemas de duas partículas também é observado em sistemas muitas partículas, ou seja, a presença de interação entre as partículas enfraquece a localização de Anderson induzida pela desordem [132, 133, 134, 135]. Dentro deste contexto, os estudos realizados, que serão apresentados nos capítulos seguintes, tem como objetivo contribuir para o entendimento no campo de excitações elementares e elétrons interagentes.

3

Dois mágnons em cadeias ferromagnéticas com desordem correlacionada

Neste capítulo serão apresentados estudos sobre excitações coletivas de spin $S = 1/2$ em sistemas unidimensionais. Mais especificamente, nós trataremos um sistema quântico de spins ferromagnéticos cujos acoplamentos entre os spins apresentam uma distribuição aleatória com correlação de longo-alcance. Neste sistema, são estimuladas duas excitações ou dois “*spin-flips*”, dando origem a duas excitações coletivas, conhecidas como mágnons¹. Os efeitos de interação surgem ao proibirmos a dupla excitação em um único spin, visto que se trata de um sistema de spin $S = 1/2$. Nossos estudos são inicialmente direcionados à caracterização da natureza dos auto-estados de dois mágnons. Para isto, é resolvida a equação de Schrödinger independente do tempo. Em seguida é investigado a evolução temporal de um pacote de onda formado por dois “*spin-flips*” para uma distância inicial entre eles dada por d_0 . Estes resultados são revelados após a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Em resumo, nossos resultados demonstram que o sistema apresentam excitações de dois mágnons estendidas para valores de energia finita quando os acoplamentos entre os spins são fortemente correlacionados. Associados a estes estados estendidos, o pacote de onda de dois mágnons apresenta um comportamento balístico. Além disso, em decorrência do spin $S = 1/2$ não permitir um duplo “*spin-flip*” nos spins da cadeia ferromagnética, os pacotes de onda de um único spin apresentam um aspecto assimétrico. Este trabalho foi publicado em 2009 na revista *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, referência [136] (ver anexo B).

3.1 Ferromagnetismo e modelo de Heisenberg

Um dos primeiros relatos históricos sobre o magnetismo são de 800 a.C, realizados na região da Grécia chamada Magnésia. Estes relatos dizem respeito a um minério, hoje conhecida como magnetita, que tinha a propriedade de atrair pedaços de ferro. Entretanto, é possível que antes dos gregos, os chineses não só tivessem conhecimento do fenômeno, mas também tivessem aplicado tecnologicamente na invenção da bússola. Contudo, os materiais magnéticos só passaram a ter importância significativa a partir do século XIII, com o uso extensivo da bússola no período das grandes navegações. A partir

¹O nome mágnon é derivado da analogia com fótons e luz, fônons e oscilações da rede.

deste período, estes materiais magnéticos passaram a ser mais explorados, tanto do ponto de vista técnico, como também científico.

Em alguns materiais observa-se um momento magnético macroscópico mesmo na ausência de um campo magnético, possuindo assim uma magnetização espontânea. Tais materiais são conhecidos como ferromagnéticos. Estes materiais foram estudados no final do século XIX por Pierre Curie ao se investigar medidas de magnetização em função da temperatura. As substâncias ferromagnéticas apresentam uma temperatura crítica de transição, acima da qual as substâncias perdem o seu comportamento ferromagnético. Somente em 1907, Weiss elaborou o primeiro modelo para o ferromagnetismo [137]. Ele postulou a existência de um campo molecular que surge a partir da interação mútua entre os elétrons que tendem a alinhar os momentos magnéticos uns com os outros. Assim, para temperaturas abaixo da temperatura de Curie o efeito do campo molecular supera as flutuações térmicas e a substância pode se comportar ferromagneticamente.

A magnetização de um sistema está inteiramente ligada à presença de momentos magnéticos que podem ser induzidos pela presença de um campo magnético externo ou não. Hoje sabemos que o magnetismo na matéria é explicado essencialmente por argumentos de mecânica quântica. A mecânica quântica antiga explicou a origem dos momentos magnéticos atômicos com o modelo de Bohr. A mecânica quântica nova, com as formulações de Schrödinger, Heisenberg e Dirac, estabeleceram uma base que foi aplicada com sucesso em sólidos e mecânica estatística. Heisenberg [138, 139] e, independentemente, Dirac [140, 141], mostraram que a origem do campo molecular proposto por Weiss estava numa interação de troca (conhecido também como interação de *exchange*, ou só mesmo *exchange*) entre os spins dos elétrons. Esta interação de *exchange*, de natureza quântica, explica interação coletiva entre os momentos magnéticos que é responsável pelo ordenamento magnético.

Supondo que os elétrons da camada de valência estejam suficientemente localizados, de maneira que seja possível associar um spin a cada átomo, podemos utilizar o hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (3.1)$$

para descrever a interação entre os átomos do sistema. Neste hamiltoniano, conhecido como hamiltoniano de Heisenberg, J_{ij} representa a constante de troca (*exchange*), \vec{S}_i e \vec{S}_j são operadores de spin que agem nos sítios i e j respectivamente. Para um ordenamento ferromagnético, ou seja, todos os spins alinhados paralelamente uns aos outros, a constante de troca deve ser positiva. Para um ordenamento antiferromagnético, ou seja, todos os spins alinhados antiparalelamente uns aos outros, a constante de troca deve ser negativa.

Considerando um material ferromagnético em seu estado fundamental, uma excitação em um de seus spins dá origem a uma perturbação coletiva em todos os spins do sistema. Estas excitações, conhecidas como ondas de spins, são quantizadas em energia. Assim, um mágnon pode ser visto como uma quantização da onda de spin.

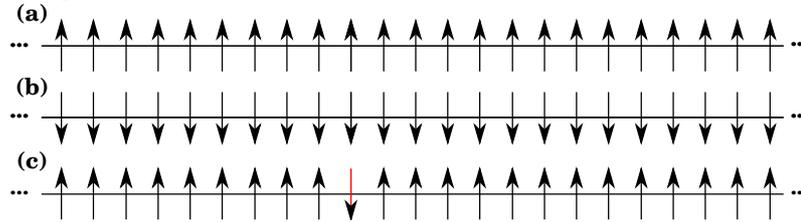
3.2 Onda de Spin: Mágnon

Na temperatura de zero absoluto, um material ferromagneto atinge o estado de menor energia, em que todos os spins apontam na mesma direção. À medida que a temperatura aumenta, mais e mais spins são desviados aleatoriamente a partir do sentido comum, aumentando a energia interna e reduzindo a magnetização líquida. Assim, estando um material ferromagnético no seu estado fundamental, uma perturbação muito sutil, faz com que o sistema deixe o seu estado fundamental e vá para um estado excitado. O desvio em um único spin dá origem a uma perturbação coletiva em todos os spins do sistema.

A observação destas excitações coletivas, denominadas ondas de spin, foram previstas inicialmente por Bloch, a fim de explicar a redução da magnetização espontânea em um ferromagneto[142]. Bloch demonstrou que as excitações de mais baixa energia do sistema formam o estado com um desvio em um único spin. O formalismo, baseado no Hamiltoniano de Heisenberg (equação 3.1), tem sido muito amplamente estudado ao longo dos anos, tanto no contexto ondas de spin em de materiais ferromagnéticos [143, 144, 145, 146], como também em materiais antiferromagnéticos [143, 147, 148].

Para que possamos compreender melhor o fenômeno no contexto ferromagnético, consideremos um caso simples de uma rede ferromagnética unidimensional contendo N spins $\vec{S} = S_x\hat{i} + S_y\hat{j} + S_z\hat{k}$ (ver figura 3.1). Para mantermos a simplicidade, consideremos que

Figura 3.1: (a) e (b) Estados fundamentais de uma cadeia ferromagnética. (c) Primeiro estado excitado da cadeia apresentada em (a).



Fonte: Autor, 2011.

existam interações apenas entre sítios vizinhos. Para este sistema, o hamiltoniano 3.1 é dado por

$$H = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \quad (3.2)$$

Sabendo que

$$S_n^\pm = S_n^x \pm iS_n^y \quad (3.3)$$

e utilizando as relações de comutação dos operadores de spin

$$\begin{aligned} [S_k^+, S_l^+] &= 2S_k^z \delta_{kl} & [S_k^z, S_l^+] &= S_k^+ \delta_{kl} \\ [S_k^z, S_l^-] &= -S_k^- \delta_{kl} & [S_k^+, S_l^+] &= [S_k^-, S_l^-] = 0 & [S_k^x, S_l^y] &= iS_k^z \delta_{kl} \end{aligned} \quad (3.4)$$

reescrevemos 3.2 como

$$H = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left\{ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right\} \quad (3.5)$$

Concentrando a nossa atenção neste último hamiltoniano, especificamente no termo entre parênteses, podemos notar que este termo transfere um desvio de spin de um dado sítio para um sítio vizinho. Sendo assim, é fácil notar a dinâmica da onda de spin. Para entendermos melhor, consideremos agora que um único desvio de spin é introduzido no sítio l da cadeia, como na figura 3.1c. A forma mais sugestiva de expressá-lo é aplicando o operador S_n^- no estado fundamental. Como o sistema inicialmente está no estado ferromagnético (figura 3.1a), podemos assumir, dentro do contexto de excitações magnéticas, o estado fundamental como um estado de vácuo $|\phi_0\rangle$. Assim o estado de uma excitação no spin do sítio l fica $|\phi_l\rangle = S_l^- |\phi_0\rangle$. Desta forma, aplicando o hamiltoniano 3.5 no estado $|\phi_n\rangle$, temos

$$H|\phi_l\rangle = \underbrace{- \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_l\rangle}_A - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\phi_l\rangle}_B - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\phi_l\rangle}_C \quad (3.6)$$

No primeiro termo (A) inserimos um termo nulo

$$A = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (S_n^z \underbrace{S_{n+1}^z S_l^-}_{\text{termo nulo}} - S_n^z \underbrace{S_l^- S_{n+1}^z}_{\text{termo nulo}} + S_n^z S_l^- S_{n+1}^z) |\phi_0\rangle \quad (3.7)$$

Utilizando as relações de comutação 3.4 e inserindo outro termo nulo temos

$$A = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [-S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,l} + (\underbrace{S_n^z S_l^-}_{\text{termo nulo}} - \underbrace{S_l^- S_n^z}_{\text{termo nulo}} + S_l^- S_n^z) S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \quad (3.8)$$

Utilizando as relações de comutação 3.4, temos

$$\begin{aligned} A &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [-S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,l} + (-S_n^- \delta_{n,l} + S_l^- S_n^z) S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \\ &= J_{l-1,l} S_l^z |\phi_l\rangle + J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_l^- S_n^z S_{n+1}^z |\phi_0\rangle \end{aligned} \quad (3.9)$$

Como no estado fundamental todos os spins estão alinhados na direção positiva de z , o operador S_n^z aplicado ao estado $|\phi_0\rangle$ assume o valor máximo S para qualquer sítio da cadeia diferente de l (sítio onde houve a excitação inicial). Assim,

$$\begin{aligned} A &= J_{l-1,l} S |\phi_l\rangle + J_{l,l+1} (\underbrace{S_l^- S_{l+1}^z}_{\text{termo nulo}} - \underbrace{S_{l+1}^z S_l^-}_{\text{termo nulo}} + S_{l+1}^z S_l^-) |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^- |\phi_0\rangle \\ A &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 |\phi_l\rangle + S (J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) |\phi_l\rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

É fácil perceber que $-\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2$ é a energia do estado fundamental. Ao analisarmos

o hamiltoniano 3.5 aplicado ao estado fundamental, lembrando que $S_n^+|\phi_0\rangle = 0$ (já que todos os spins já se encontram na direção positiva), temos $H|\phi_0\rangle = E_0|\phi_0\rangle^2$. Assim, podemos reescrever

$$A = E_0|\phi_l\rangle + S(J_{l-1,l} + J_{l,l+1})|\phi_l\rangle \quad (3.11)$$

No segundo termo (B), utilizando as relações de comutação 3.4 e o fato que $\vec{S}_n^z|\phi_0\rangle = S|\phi_0\rangle$ e $S_n^+|\phi_0\rangle = 0$, temos

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- S_l^- |\phi_0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (\underbrace{S_n^+ S_{n+1}^-}_{-S_n^- S_{n+1}^+} + S_{n+1}^- S_n^+) S_l^- |\phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_{n+1}^- (\underbrace{S_n^+ S_n^-}_{-S_n^- S_n^+} + S_n^- S_n^+) |\phi_0\rangle = -J_{l,l+1} S|\phi_{l+1}\rangle \end{aligned} \quad (3.12)$$

No terceiro termo (C), de maneira análoga, obtemos

$$C = -J_{l,l-1} S|\phi_{l-1}\rangle \quad (3.13)$$

Ao coletarmos os termos A, B, e C, temos como resultado da equação 3.6

$$H|\phi_l\rangle = E_0|\phi_l\rangle + S(J_{l-1,l} + J_{l,l+1})|\phi_l\rangle - J_{l,l+1} S|\phi_{l+1}\rangle - J_{l,l-1} S|\phi_{l-1}\rangle \quad (3.14)$$

Esta última equação estabelece claramente que um desvio no sítio l não fica localizado em l , mas propaga-se pela cadeia através de seus vizinhos $l+1$ e $l-1$. Assim, devido à interação entre os spins, se começarmos com um determinado spin para baixo, há uma certa probabilidade que em um tempo posterior ao invés dele, um outro spin esteja para baixo. Esta propagação estabelece a excitação coletiva do sistema, formando assim a onda de spin. Vemos também que $|\phi_l\rangle$ não é um autoestado de H (equação 3.5), pois um desvio no sítio l não fica localizado em l . Portanto, para determinarmos qual estado representa esta configuração, representamos $|\Phi\rangle$ como o estado de 1 mágnon, ou seja

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \quad (3.15)$$

onde os números f_n representam as amplitudes de probabilidade de ocorrer um único desvio no sítio n .

Através da equação de Schrödinger $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$ temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_{n=1}^N f_n H|\phi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2SN}} E \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \\ \sum_{n=1}^N \{ [E_0 + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})] f_n |\phi_n\rangle - J_{n,n+1} S f_n |\phi_{n+1}\rangle - J_{n,n-1} S f_n |\phi_{n-1}\rangle \} &= E \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \end{aligned}$$

²Para o caso em que todos as constante de troca sejam iguais, temos $H|\phi_0\rangle = E_0|\phi_0\rangle = -NJS^2|\phi_0\rangle$.

$$\sum_{n=1}^N (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n |\phi_n\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} f_n |\phi_{n+1}\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n-1} f_n |\phi_{n-1}\rangle = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \quad (3.16)$$

Como estamos somando sobre todos os n estados de 1 mágnon, fazendo $n = n + 1$ no segundo somatório e $n = n - 1$ no terceiro somatório, obtemos

$$\sum_{n=1}^N [(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n+1,n} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1}] |\phi_n\rangle = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle \quad (3.17)$$

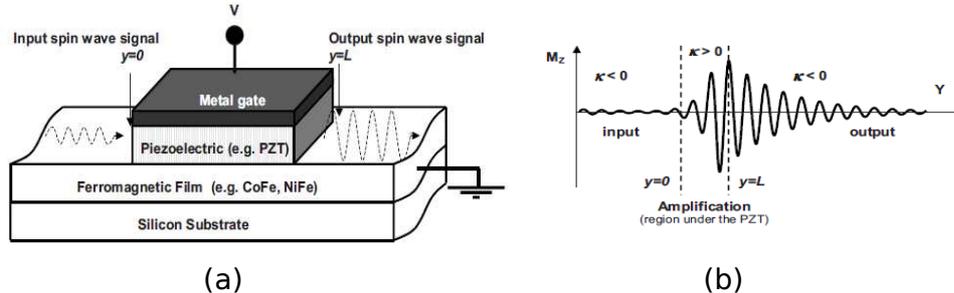
Sendo $S = 1/2$ e fazendo $\varepsilon = E - E_0$, temos a equação de Schrödinger em função das amplitudes de probabilidade f_n dada por

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n+1,n} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1} = 2\varepsilon f_n \quad (3.18)$$

Esta última expressão nos dá uma relação de recorrência que é de grande importância para o estudo de ondas de spin. Ela possibilita, por exemplo, a obtenção da representação matricial do hamiltoniano no subespaço formado por todos estados de 1 “*spin-flip*”. Através da representação matricial, utilizando rotinas numéricas apropriadas, a obtenção dos autovalores e autovetores do hamiltoniano torna-se possível. Este tipo de procedimento que vem sendo utilizado nos últimos anos, permite o estudo das propriedades de localização das ondas de spin através de técnicas que foram desenvolvidas para sistemas eletrônicos [81, 82, 83, 84, 96, 149, 150, 151]. Apresentado inicialmente por Ziman [81], esta abordagem possibilitou a demonstração, por exemplo, de que uma excitação spin inicialmente localizada pode apresentar um comportamento superdifusivo na presença de desordem [84], contrastando com a previsão da teoria de escala para o comportamento eletrônico. Sabe-se também da existência de uma fase de ondas de spin estendidas na região de baixa energia para uma distribuição de acoplamentos aperiódica [96].

No contexto dos estudos experimentais e/ou aplicados, as ondas de spin tem se tornado importante devido a um amplo campo de aplicações. Estes estudos visam o desenvolvimento da tecnologia, onde materiais magnéticos são utilizados. O surgimento da “*spintrônica*”, em que os spins dos elétrons são usados para operações de lógica e memória, promete ser uma rota alternativa para dispositivos eletrônicos. Estudos experimentais tem sido apresentados nos últimos anos [152, 153, 154, 155, 156, 157]. Como exemplo temos o trabalho de Alexander Khitun e colaboradores que propõem e analisam um amplificador de ondas de spin destinados ao aumento da amplitude da onda de spin propagando através do efeito magnetoeletrônicos. O amplificador é uma estrutura de duas camadas multiferrômicas, que inclui materiais piezoeletrônicos e ferromagnéticos [155]. O amplificador consiste em um substrato semiconductor (por exemplo, silício), um filme de condução ferromagnético (por exemplo *CoFe*), e uma camada de material piezoeletrico (por exemplo, titanato zirconato de chumbo). O filme ferromagnético serve como um guia de onda para as ondas de spin (ver figura 3.2). O estudo foi baseado no conceito de que a amplitude da onda de spin está sujeito a amortecimento durante a propagação por causa da espalhamento, por exemplo, magnon-magnon e fônon-magnon. Ou seja, o objetivo do amplificador é

Figura 3.2: (a) Esquema do amplificador de ondas de spin. O filme ferromagnético serve como um guia de onda propagando de ondas de spin. A amplitude da onda de spin propagante é amplificada na região sob a camada piezelétrica através de acoplamentos magnetoelétricos. (b) Amplitude da onda de spin vs coordenada y . A amplitude da onda de spin é aumentar à medida que se propaga dentro do piezoelétricos.



Fonte: A. Khitun, 2009 (referência [155]).

aumentar a amplitude da onda de spin propagando preservando a fase. Potencialmente, amplificadores magnetoelétricos podem ser usados em circuitos lógicos baseados em ondas de spin, proporcionando ganho para compensar as perdas durante a propagação do sinal da onda de spin [155]. Alexander Khitun e colaboradores descrevem e analisam possíveis abordagens para circuitos lógicos baseados em propagação de mágns e os elementos básicos necessários para a construção deste circuito [156]. Maiores informações das aplicações tecnológicas, podem ser vistas nos trabalhos [152, 153, 154, 155, 156, 157] e referências contidas nos mesmos.

3.3 Excitação de 2 Mágns em cadeias com desordem correlacionada

3.3.1 Excitação de 2 Mágns em cadeias ferromagnéticas

Desvios gerados em dois spins de uma cadeia ferromagnética a partir do seu estado fundamental gera estados de 2 mágns, ou seja, 2 ondas de spin. Assim, o estudo de 2 mágns possui um elemento não presente no caso de 1 mágno: a interação entre as ondas magnéticas propagantes. Tendo em mente que a interação entre elétrons apresenta um importante papel no comportamento do sistema eletrônico e lembrando do mapeamento do sistema para 1 mágno em um problema eletrônico, espera-se que a interação entre ondas de spin desempenhe relevantes contribuições nas propriedades termodinâmicas dos materiais a baixas temperaturas.

Os primeiros estudos direcionados aos efeitos da interação entre ondas de spin foram realizados por Bethe [158]. Seus estudos, baseados em uma cadeia de spins unidimensional, mostram a existência de ondas não-interagentes de Bloch e excitações nas quais um bloco de dois ou mais spins desviados transladam juntos pela cadeia. Alguns anos depois, Holstein e Primakoff também direcionaram esforços ao estudo de ondas de spin interagentes [159]. Seu modelo consistia de uma rede ferromagnética 3d de spins em sob influência de um campo magnético externo. Seus resultados permitiram descrever os estados quânti-

cos através de duas partes do hamiltoniano original: uma relacionada ao comportamento não-interagente das ondas de spin, e outra relacionada aos efeitos de interação entre as mesmas. Dyson direcionou seus estudos aos cálculos das propriedades termodinâmicas para baixas temperaturas do sistema ferromagnético 3d para baixas temperaturas [160]. Michael Wortis estudou o modelo de Heisenberg 1d, 2d e 3d e demonstrou a existência de estados ligados (um bloco de dois ou mais spins desviados transladam juntos pela rede) proposto por Bethe em 1d [161]. Mais recentemente, Nascimento, Moura e Lyra estudaram a natureza de dois mágnons em cadeias ferromagnéticas desordenadas de spin 1/2 [162]. Eles mostraram que, devido à interação efetiva de excitação imposta pela regra de exclusão, os estados de 2-mágnons de baixa energia mostram uma forte correlação spin-spin, em comparação com os estados mais localizados de alta energia. Além disso, mostrou-se que a distância média entre as duas excitações evolui no tempo difusamente, enquanto a dispersão de pacotes de onda evolui superdifusivamente.

Para entendermos melhor os aspectos inerentes às excitações de 2 mágnons em cadeias ferromagnéticas, iremos desenvolver o formalismo matemático baseado no formalismo desenvolvido na seção anterior. Considerando o sistema inicialmente no estado ferromagnético (figura 3.1a), em termos de excitações magnéticas, assumimos que este se trata de um estado de vácuo $|\phi_0\rangle$. Desta forma, o estado de duas excitações de spin, uma no sítio n_1 e outra no sítio n_2 , pode ser escrito como $|\phi_{n_1, n_2}\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle$. Assim, aplicando a equação 3.5 ao estado $|\phi_{n_1, n_2}\rangle$ temos

$$\begin{aligned}
H|\phi_{n_1, n_2}\rangle &= \underbrace{-\sum_{n=1}^N J_{n, n+1} S_n^z S_{n+1}^z}_{A_1} |\phi_{n_1, n_2}\rangle - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n, n+1} S_n^+ S_{n+1}^-}_{B_1} |\phi_{n_1, n_2}\rangle \\
&- \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n, n+1} S_n^- S_{n+1}^+}_{C_1} |\phi_{n_1, n_2}\rangle
\end{aligned} \tag{3.19}$$

A análise do problema com um mágnon em uma cadeia ferromagnética de spin $S = 1/2$ nos revelou uma onda de spin propagando pela cadeia. Dado uma excitação num dado spin da cadeia, surgem estados com probabilidade de encontrar um *spin-flip* num sítio posterior e também em um sítio anterior (ver equação 3.18). Como nosso sistema atual consiste em uma cadeia ferromagnética de spins $S = 1/2$ em que serão excitados 2 mágnons, é intuitivo pensar no fato de termos relações de recorrência distintas para *spin-flips* em sítios vizinhos e sítios não vizinhos. Isto porque, um mesmo spin nunca apresentará duas excitações. Sendo assim, consideremos inicialmente o caso em que as excitações ocorrem em sítios vizinhos (ou seja, $n_1 = l$ e $n_2 = l + 1$). Da equação 3.19 temos

$$\begin{aligned}
H|\phi_{l, l+1}\rangle &= \underbrace{-\sum_{n=1}^N J_{n, n+1} S_n^z S_{n+1}^z S_l^- S_{l+1}^-}_{A_1} |\phi_0\rangle - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n, n+1} S_n^+ S_{n+1}^- S_l^- S_{l+1}^-}_{B_1} |\phi_0\rangle \\
&- \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n, n+1} S_n^- S_{n+1}^+ S_l^- S_{l+1}^-}_{C_1} |\phi_0\rangle
\end{aligned} \tag{3.20}$$

No primeiro termo (A_1), com ajuda das relações de comutação 3.4 e usando o fato que $\vec{S}_n^z|\phi_0\rangle = S|\phi_0\rangle$ e $S_n^+|\phi_0\rangle = 0$, temos

$$\begin{aligned}
A_1 &= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (S_n^z \underbrace{S_{n+1}^- S_l^-}_{S_{n+1}^- S_l^-} - S_n^z \underbrace{S_l^- S_{n+1}^z}_{S_l^- S_{n+1}^z} + S_n^z S_l^- S_{n+1}^z) S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (-S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,l} + \underbrace{S_n^z S_l^-}_{S_n^z S_l^-} S_{n+1}^z - \underbrace{S_l^- S_n^z}_{S_l^- S_n^z} S_{n+1}^z + S_l^- S_n^z S_{n+1}^z) S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,l} - S_n^- S_{n+1}^z \delta_{l,n}) S_{l+1}^- + S_l^- S_n^z \underbrace{S_{n+1}^z S_{l+1}^-}_{S_{n+1}^z S_{l+1}^-} - S_l^- S_n^z \underbrace{S_{l+1}^- S_{n+1}^z}_{S_{l+1}^- S_{n+1}^z} \\
&\quad + S_l^- S_n^z S_{l+1}^- S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,l} - S_n^- S_{n+1}^z \delta_{l,n}) S_{l+1}^- - S_l^- S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,l+1} \\
&\quad + S_l^- \underbrace{S_n^z S_{l+1}^-}_{S_n^z S_{l+1}^-} S_{n+1}^z - S_l^- \underbrace{S_{l+1}^- S_n^z}_{S_{l+1}^- S_n^z} S_{n+1}^z + S_l^- S_{l+1}^- S_n^z S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \\
&= J_{l-1,l} S_{l-1}^z S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle + J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z S_{l+1}^- |\phi_0\rangle + J_{l,l+1} S_l^- S_l^z S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&\quad + J_{l+1,l+2} S_l^- S_{l+1}^- S_{l+2}^z |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&= J_{l-1,l} (S_{l-1}^z S_l^- S_{l+1}^- - S_l^- S_{l-1}^z S_{l+1}^- + S_l^- S_{l-1}^z S_{l+1}^-) |\phi_0\rangle + J_{l,l+1} (S_l^- S_{l+1}^- S_{l+1}^z \\
&\quad - S_l^- S_{l+1}^- S_{l+1}^z + S_l^- S_{l+1}^- S_{l+1}^z) |\phi_0\rangle + J_{l,l+1} (S_l^- S_{l+1}^z S_{l+1}^- - S_l^- S_{l+1}^- S_l^z + S_l^- S_{l+1}^- S_l^z) |\phi_0\rangle \\
&\quad + J_{l+1,l+2} (S S_l^- S_{l+1}^-) |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&= J_{l-1,l} (S_l^- S_{l-1}^z S_{l+1}^- - S_l^- S_{l+1}^- S_{l-1}^z + S_l^- S_{l+1}^- S_{l-1}^z) |\phi_0\rangle + J_{l,l+1} (-S_l^- S_{l+1}^- \\
&\quad + S S_l^- S_{l+1}^- + S S_l^- S_{l+1}^-) |\phi_0\rangle + J_{l+1,l+2} (S S_l^- S_{l+1}^-) |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&= J_{l-1,l} S S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle + J_{l,l+1} (-S_l^- S_{l+1}^- + 2 S S_l^- S_{l+1}^-) |\phi_0\rangle + J_{l+1,l+2} S S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \\
&\quad - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^- S_{l+1}^- |\phi_0\rangle \quad (3.21)
\end{aligned}$$

Como $-\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2$ é a energia do estado fundamental, podemos reescrever

$$A_1 = E_0 |\phi_{l,l+1}\rangle + \frac{1}{2} (J_{l-1,l} + J_{l+1,l+2}) |\phi_{l,l+1}\rangle \quad (3.22)$$

No segundo termo (B_1) vemos que: Se $n = l$ temos $B_2 = 0$; Se $n = l + 1$ temos $B_2 \neq 0$; Se $l \neq n + 1$ temos $B_2 = 0$. Estas conclusões estão aliadas ao fato de que $S_n^+|\phi_0\rangle = 0$ e um mesmo spin não pode ser excitado duas vezes (pois $S = 1/2$). Assim, o único termo não nulo do somatório é

$$B_1 = -\frac{1}{2} J_{l+1,l+2} S_{l+1}^+ S_{l+2}^- (S_l^- S_{l+1}^-) |\phi_0\rangle \quad (3.23)$$

Nesta última expressão, através das relações de comutação 3.4 e lembrando que $S_n^+|\phi_0\rangle = 0$, temos

$$\begin{aligned}
B_1 &= -\frac{1}{2}J_{l+1,l+2}S_{l+1}^+S_{l+2}^-\underbrace{(S_l^-S_{l+1}^- - S_{l+1}^-S_l^-)}_{+S_{l+1}^-S_l^-}|\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2}J_{l+1,l+2}\underbrace{(S_{l+1}^+S_{l+2}^- - S_{l+2}^-S_{l+1}^-)}_{+S_{l+2}^-S_{l+1}^-}S_{l+1}^-S_l^-|\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2}J_{l+1,l+2}(S_{l+2}^- \underbrace{S_{l+1}^+S_{l+1}^-}_{-S_{l+2}^-S_{l+1}^-} - S_{l+2}^- \underbrace{S_{l+1}^-S_{l+1}^+}_{+S_{l+2}^-S_{l+1}^-} + S_{l+2}^-S_{l+1}^-S_{l+1}^+)S_l^-|\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2}J_{l+1,l+2}(2S_{l+2}^- \underbrace{S_{l+1}^zS_l^-}_{-2S_{l+2}^-S_l^-} - 2S_{l+2}^- \underbrace{S_l^-S_{l+1}^z}_{+2S_{l+2}^-S_l^-} + 2S_{l+2}^-S_l^-S_{l+1}^z)|\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2}J_{l+1,l+2}|\phi_{l,l+2}\rangle
\end{aligned} \tag{3.24}$$

No terceiro termo (C_1), de maneira análoga, obtemos

$$C_1 = -\frac{1}{2}J_{l-1,l}S|\phi_{l-1,l+1}\rangle \tag{3.25}$$

Ao reunirmos os termos A_1 , B_1 , e C_1 , temos como resultado da equação 3.19

$$H|\phi_{l,l+1}\rangle = E_0|\phi_{l,l+1}\rangle + \frac{1}{2}(J_{l-1,l} + J_{l+1,l+2})|\phi_{l,l+1}\rangle - \frac{1}{2}J_{l+1,l+2}|\phi_{l,l+2}\rangle - \frac{1}{2}J_{l-1,l}|\phi_{l-1,l+1}\rangle \tag{3.26}$$

Semelhante ao que observamos para 1 mágnon, observamos que $|\phi_{l,+1}\rangle$ não representa um auto estado do sistema, pois os spins desviados nos sítios l e $l+1$ não permanecem localizados, propagando-se para os sítios vizinhos $l-1$ e $l+2$. Assim como fizemos para 1 mágnon, representaremos $|\Phi\rangle$ como estado de 2 mágnons expandido na base de 2 *spin-flips*, de maneira que a equação de Schrödinger independente do tempo ($H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$) fica

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q}E|\phi_{l,l+1}\rangle &= \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q}E_0|\phi_{l,l+1}\rangle + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q}\frac{1}{2}(J_{l-1,l} + J_{l+1,l+2})|\phi_{l,l+1}\rangle \\
&\quad - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q}\frac{1}{2}J_{l+1,l+2}|\phi_{l,l+2}\rangle - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q}\frac{1}{2}J_{l-1,l}|\phi_{l-1,l+1}\rangle
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Fazendo $\varepsilon = E - E_0$, temos a equação de Schrödinger em função das amplitudes de probabilidade $f_{p,q}$ dada por

$$2\varepsilon f_{n,n+1} = (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2})f_{n,n+1} - J_{n+1,n+2}f_{n,n+2} - J_{n-1,n}f_{n-1,n+1} \tag{3.28}$$

Agora, partindo da equação 3.19 e considerando o caso em que as excitações iniciais não ocorram em sítios vizinhos (sítios n_1 e n_2), temos

$$\begin{aligned}
H|\phi_{n_1,n_2}\rangle &= -\underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n,n+1}S_n^zS_{n+1}^zS_{n_1}^-S_{n_2}^-}_{A_2}|\phi_0\rangle - \frac{1}{2}\underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n,n+1}S_n^+S_{n+1}^-S_{n_1}^-S_{n_2}^-}_{B_2}|\phi_0\rangle \\
&\quad - \frac{1}{2}\underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n,n+1}S_n^-S_{n+1}^+S_{n_1}^-S_{n_2}^-}_{C_2}|\phi_0\rangle
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Com ajuda das relações de comutação 3.4, reescrevemos o primeiro termo (A_2) como

$$\begin{aligned}
A_2 &= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (S_n^z \underbrace{S_{n+1}^z S_{n_1}^-}_{S_{n_1}^-} S_{n_2}^- - S_n^z \underbrace{S_{n_1}^- S_{n+1}^z}_{S_{n_1}^-} S_{n_2}^- + S_n^z S_{n_1}^- S_{n+1}^z S_{n_2}^-) |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-S_n^z S_{n+1}^- S_{n_2}^- \delta_{n+1,n_1}) + (\underbrace{S_n^z S_{n_1}^-}_{S_{n_1}^-} + S_{n_1}^- S_n^z - \underbrace{S_{n_1}^- S_n^z}_{S_{n_1}^-}) S_{n+1}^z S_{n_2}^-] |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-S_n^z S_{n+1}^- S_{n_2}^- \delta_{n+1,n_1}) - S_n^- S_{n+1}^z S_{n_2}^- \delta_{n,n_1} + S_{n_1}^- S_n^z (\underbrace{S_{n+1}^z S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} - \underbrace{S_{n_2}^- S_{n+1}^z}_{S_{n_2}^-} \\
&\quad + S_{n_2}^- S_{n+1}^z)] |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-S_n^z S_{n+1}^- S_{n_2}^- \delta_{n+1,n_1}) - S_n^- S_{n+1}^z S_{n_2}^- \delta_{n,n_1} - S_{n_1}^- S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,n_2} \\
&\quad + S_{n_1}^- (\underbrace{S_n^z S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} - \underbrace{S_{n_2}^- S_n^z}_{S_{n_2}^-} + S_{n_2}^- S_n^z) S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-S_n^z S_{n+1}^- S_{n_2}^- \delta_{n+1,n_1}) - S_n^- S_{n+1}^z S_{n_2}^- \delta_{n,n_1} - S_{n_1}^- S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n+1,n_2} \\
&\quad - S_{n_1}^- S_n^- S_{n+1}^z \delta_{n,n_2} + S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_n^z S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \\
&= (J_{n_1-1,n_1} S_{n_1-1}^z S_{n_1}^- S_{n_2}^- + J_{n_1,n_1+1} S_{n_1}^- S_{n_1+1}^z S_{n_2}^- + J_{n_2-1,n_2} S_{n_1}^- S_{n_2-1}^z S_{n_2}^- \\
&\quad + J_{n_2,n_2+1} S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_{n_2+1}^z - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_{n_1}^- S_{n_2}^-) |\phi_0\rangle \\
&= J_{n_1-1,n_1} (\underbrace{S_{n_1-1}^z S_{n_1}^-}_{S_{n_1}^-} - \underbrace{S_{n_1}^- S_{n_1-1}^z}_{S_{n_1}^-} + S_{n_1}^- S_{n_1-1}^z) S_{n_2}^- |\phi_0\rangle + J_{n_1,n_1+1} (S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_1+1}^z S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} \\
&\quad - S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_2}^- S_{n_1+1}^z}_{S_{n_2}^-} + S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_{n_1+1}^z) |\phi_0\rangle + J_{n_2-1,n_2} (S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_2-1}^z S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} - S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_2}^- S_{n_2-1}^z}_{S_{n_2}^-} \\
&\quad + S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_{n_2-1}^z) |\phi_0\rangle + J_{n_2,n_2+1} S |\phi_{n_1,n_2}\rangle + E_0 |\phi_{n_1,n_2}\rangle \\
&= J_{n_1-1,n_1} (S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_1-1}^z S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} - S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_2}^- S_{n_1-1}^z}_{S_{n_2}^-} + S_{n_1}^- S_{n_2}^- S_{n_1-1}^z) |\phi_0\rangle + J_{n_1,n_1+1} S |\phi_{n_1,n_2}\rangle \\
&\quad + J_{n_2-1,n_2} S |\phi_{n_1,n_2}\rangle + J_{n_2,n_2+1} S |\phi_{n_1,n_2}\rangle + E_0 |\phi_{n_1,n_2}\rangle \\
&= (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1}) S |\phi_{n_1,n_2}\rangle + E_0 |\phi_{n_1,n_2}\rangle \quad (3.30)
\end{aligned}$$

No segundo termo (B_2), novamente utilizamos as relações de comutação 3.4 e o fato de que $S_n^+ |\phi_0\rangle = 0$, temos

$$\begin{aligned}
B_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ (\underbrace{S_{n+1}^- S_{n_1}^-}_{S_{n_1}^-} - \underbrace{S_{n_1}^- S_{n+1}^-}_{S_{n_1}^-} + S_{n_1}^- S_{n+1}^-) S_{n_2}^- |\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (\underbrace{S_{n+1}^+ S_{n_1}^-}_{S_{n_1}^-} - \underbrace{S_{n_1}^- S_{n+1}^+}_{S_{n_1}^-} + S_{n_1}^- S_n^+) S_{n+1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [2S_n^z S_{n+1}^- S_{n_2}^- \delta_{n,n_1} + S_{n_1}^- S_n^+ (\underbrace{S_{n+1}^- S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} - \underbrace{S_{n_2}^- S_{n+1}^-}_{S_{n_2}^-} + S_{n_2}^- S_{n+1}^-)] |\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [2S_n^z S_{n+1}^- S_{n_2}^- \delta_{n,n_1} + S_{n_1}^- (\underbrace{S_n^+ S_{n_2}^-}_{S_{n_2}^-} - \underbrace{S_{n_2}^- S_n^+}_{S_{n_2}^-} + S_{n_2}^- S_n^+) S_{n+1}^-] |\phi_0\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [2S_n^z S_{n+1}^- S_{n+2}^- \delta_{n,n_1} + 2S_{n_1}^- S_n^z S_{n+1}^- \delta_{n,n_2}] |\phi_0\rangle \\
&= (-J_{n_1,n_1+1} S_{n_1}^z S_{n_1+1}^- S_{n_2}^- + J_{n_2,n_2+1} S_{n_1}^- S_{n_2}^z S_{n_2+1}^-) |\phi_0\rangle \\
&= -J_{n_1,n_1+1} (\underbrace{S_{n_1}^z S_{n_1+1}^-}_{S_{n_1+1}^- S_{n_1}^z} S_{n_2}^- - \underbrace{S_{n_1+1}^- S_{n_1}^z}_{S_{n_1}^- S_{n_1+1}^z} S_{n_2}^- + S_{n_1+1}^- S_{n_1}^z S_{n_2}^-) |\phi_0\rangle \\
&\quad + J_{n_2,n_2+1} (S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_2}^z S_{n_2+1}^-}_{S_{n_2+1}^- S_{n_2}^z} - S_{n_1}^- \underbrace{S_{n_2+1}^- S_{n_2}^z}_{S_{n_2}^- S_{n_2+1}^z} + S_{n_1}^- S_{n_2+1}^- S_{n_2}^z) |\phi_0\rangle \\
&= -J_{n_1,n_1+1} (S_{n_1+1}^- \underbrace{S_{n_1}^z S_{n_2}^-}_{S_{n_1}^- S_{n_2}^z}) - S_{n_1+1}^- \underbrace{S_{n_2}^- S_{n_1}^z}_{S_{n_1}^- S_{n_2}^z} + S_{n_1+1}^- S_{n_2}^- S_{n_1}^z) |\phi_0\rangle + J_{n_2,n_2+1} S |\phi_{n_1,n_2+1}\rangle \\
&= -J_{n_1,n_1+1} S |\phi_{n_1+1,n_2}\rangle - J_{n_2,n_2+1} S |\phi_{n_1,n_2+1}\rangle \tag{3.31}
\end{aligned}$$

Analogamente, encontramos o terceiro termo (C_2) como

$$C_2 = -J_{n_1-1,n_1} S |\phi_{n_1-1,n_2}\rangle - J_{n_2-1,n_2} S |\phi_{n_1,n_2-1}\rangle \tag{3.32}$$

Ao reunirmos os termos A_2 , B_2 e C_2 , temos como resultado da equação 3.19

$$\begin{aligned}
H|\phi_{n_1,n_2}\rangle &= E_0|\phi_{n_1,n_2}\rangle + (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1}) S |\phi_{n_1,n_2}\rangle \\
&\quad - J_{n_1,n_1+1} S |\phi_{n_1+1,n_2}\rangle - J_{n_2,n_2+1} S |\phi_{n_1,n_2+1}\rangle - J_{n_1-1,n_1} S |\phi_{n_1-1,n_2}\rangle - J_{n_2-1,n_2} S |\phi_{n_1,n_2-1}\rangle \tag{3.33}
\end{aligned}$$

Sendo $|\Phi\rangle$ autoestado de 2mágnons, expandindo na base de 2 *spin-flips*, a equação de Schrödinger independente do tempo fica

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} E_0 |\phi_{n_1,n_2}\rangle + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} \frac{1}{2} (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1}) |\phi_{n_1,n_2}\rangle \\
&\quad - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} \frac{1}{2} J_{n_1,n_1+1} |\phi_{n_1+1,n_2}\rangle - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} \frac{1}{2} J_{n_2,n_2+1} |\phi_{n_1,n_2+1}\rangle - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} \frac{1}{2} J_{n_1-1,n_1} |\phi_{n_1-1,n_2}\rangle \\
&\quad - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} \frac{1}{2} J_{n_2-1,n_2} |\phi_{n_1,n_2-1}\rangle = \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} f_{p,q} E |\phi_{n_1,n_2}\rangle \tag{3.34}
\end{aligned}$$

Sendo $\varepsilon = E - E_0$, temos a equação de Schrödinger em função das amplitudes de probabilidade $f_{p,q}$ dada por

$$\begin{aligned}
2\varepsilon f_{n_1,n_2} &= (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1}) f_{n_1,n_2} - J_{n_1,n_1+1} f_{n_1+1,n_2} \\
&\quad - J_{n_2,n_2+1} f_{n_1,n_2+1} - J_{n_1-1,n_1} f_{n_1-1,n_2} - J_{n_2-1,n_2} f_{n_1,n_2-1} \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Notamos que a relação de recorrência para 2 mágnons é composta por duas partes: uma parte referente a desvios em sítios vizinhos (equação 3.28) e outra parte referente a desvios em sítios não vizinhos (equação 3.35). Essas relações de recorrência podem ser utilizadas para obtenção da representação matricial do Hamiltoniano na base de estados com 2 *spin-flip* $|\phi_{n_1,n_2}\rangle$. Por exemplo, ao considerarmos uma cadeia com $N = 5$ spins,

temos como estados possíveis:

$$|\phi_{1,2}\rangle; |\phi_{1,3}\rangle; |\phi_{1,4}\rangle; |\phi_{1,5}\rangle; |\phi_{2,3}\rangle; |\phi_{2,4}\rangle; |\phi_{2,5}\rangle; |\phi_{3,4}\rangle; |\phi_{3,5}\rangle; |\phi_{4,5}\rangle \quad (3.36)$$

Assim, para este caso, com o auxílio das equações 3.28 e 3.35, podemos escrever a matriz do hamiltoniano como

$$H = \begin{array}{c|cccccccccc} & |\phi_{1,2}\rangle & |\phi_{1,3}\rangle & |\phi_{1,4}\rangle & |\phi_{1,5}\rangle & |\phi_{2,3}\rangle & |\phi_{2,4}\rangle & |\phi_{2,5}\rangle & |\phi_{3,4}\rangle & |\phi_{3,5}\rangle & |\phi_{4,5}\rangle \\ \hline \langle\phi_{1,2}| & D_1 & -J_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,3}| & -J_{2,3} & D_2 & -J_{3,4} & 0 & -J_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,4}| & 0 & -J_{3,4} & D_2 & -J_{4,5} & 0 & -J_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,5}| & 0 & 0 & -J_{4,5} & D_2 & 0 & 0 & -J_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,3}| & 0 & -J_{1,2} & 0 & 0 & D_3 & -J_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,4}| & 0 & 0 & -J_{1,2} & 0 & -J_{3,4} & D_4 & -J_{4,5} & -J_{2,3} & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,5}| & 0 & 0 & 0 & -J_{1,2} & 0 & -J_{4,5} & D_5 & -J_{2,3} & -J_{2,3} & 0 \\ \langle\phi_{3,4}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_{2,3} & -J_{2,3} & D_6 & -J_{4,5} & 0 \\ \langle\phi_{3,5}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_{2,3} & -J_{4,5} & D_7 & -J_{3,4} \\ \langle\phi_{4,5}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_{3,4} & D_8 \end{array} \quad (3.37)$$

A simplificação do termo diagonal foi devido a organização da matriz. Este termo é obtido da expressão entre parênteses da equação 3.35, por exemplo: $D_1 = J_{0,1} + J_{2,3}$, $D_2 = J_{0,3} + J_{1,2} + J_{2,3} + J_{3,4}$ e assim consecutivamente. Devemos notar que num sistema de 2 mágns numa cadeia de spins temos $N(N - 1)/2$ configurações possíveis. Assim, as matrizes do problema de 2 mágns possuem dimensão $N(N - 1)/2 \times N(N - 1)/2$, restringindo um pouco a análise de cadeias muito grandes devido ao esforço computacional.

Através da diagonalização direta do hamiltoniano, resolvido computacionalmente, obtemos autovalores e autovetores e utilizamos os mesmos para calcular grandezas que caracterizem quantitativamente o nosso sistema. Para diagonalização é preciso o uso de rotinas apropriadas, que podem ser encontradas nas referências [163, 164]. Particularmente, nós utilizamos rotinas Lapack [164] para os cálculos referentes aos aspectos estacionários de 2 mágns.

Podemos também investigar o caráter dinâmico do pacote de onda de 2 mágns, assim como apresentado nas referências [84, 96, 151, 162]. Neste caso, resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo para dois mágns

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle = H |\Phi(t)\rangle \quad (3.38)$$

onde H é o hamiltoniano 3.2 e $|\Phi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2}(t) |\phi_{n_1, n_2}\rangle$ onde $|\phi_{n_1, n_2}\rangle$ é um estado com spin-flips nos sítios n_1 e n_2 ($|\phi_{n_1, n_2}\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- |\phi_0\rangle$). Visto que as expressões 3.28 e 3.35 são obtidas de $H|\Phi\rangle$, é fácil perceber que a equação de Schrödinger dependente do tempo em termos dos coeficientes $f_{n_1, n_2}(t)$ é dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n, n+1}(t) = (J_{n+1, n} + J_{n+1, n+2}) f_{n, n+1} - J_{n+1, n+2} f_{n, n+2}(t) - J_{n-1, n} f_{n-1, n+1} \quad (3.39)$$

para desvios em sítios vizinhos e

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} = (J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1} + J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1}) f_{n_1, n_2} - J_{n_1, n_1+1} f_{n_1+1, n_2} - J_{n_2, n_2+1} f_{n_1, n_2+1} - J_{n_1-1, n_1} f_{n_1-1, n_2} - J_{n_2-1, n_2} f_{n_1, n_2-1} \quad (3.40)$$

para desvios em sítios não vizinhos.

Os cálculos das amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado pode ser obtido através de algoritmo de Runge-Kutta [163]. Entretanto, em nossos cálculos nós empregamos o método numérico baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal:

$$V(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!} \quad (3.41)$$

onde H é o hamiltoniano (ver apêndice A2). A função de onda num tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$, de maneira que usamos o método recursivamente para obter a função de onda no tempo t . Nos resultados que iremos apresentar usamos $\Delta t = 0,05$ e $n_0 = 20$. Os valores para a ordem de truncamento ($n_0 = 20$) 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, com precisão $|1 - |\Phi(t)|^2| < 10^{-9}$.

3.3.2 Distribuição correlacionada de longo alcance nos termos de exchange

Até o presente momento vimos como estudar os aspectos estacionários e dinâmicos de 2 mágnons. Entretanto, nosso modelo consiste de uma cadeia com N spins ($S = 1/2$) com acoplamentos de primeiro vizinhos cujo o termo de *exchange* apresenta uma desordem correlacionada de longo alcance. Devemos lembrar que a presença de correlações na distribuição da desordem é responsável por comportamentos não previstos no modelo de Anderson de baixa dimensionalidade (ver seção 2.3.3).

Com base no trabalho pioneiro de Moura e Lyra [104], nós consideramos em nosso modelo que os termos de exchange $J_{n, n+1} = J_n$ serão dados por

$$J_n = 2 + \frac{x_n}{\Delta x} \quad (3.42)$$

onde

$$x_n = \tanh \left[\sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos \left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k \right) \right] \quad (3.43)$$

Vemos que x_n é restrito ao intervalo $-1 \leq x_n \leq 1$. Podemos dizer que a equação acima é a decomposição de Fourier discreta da sequência $x_n(t)$. Uma densidade espectral tipo lei de potência ($1/k^\alpha$) caracteriza a ausência de um comprimento de correlação típico na distribuição da desordem [165]. Isso nos permite a investigação da influência da desordem livre de escala sobre as propriedades das excitações magnéticas coletivas. Na expressão

3.42, Δx é uma constante de normalização de maneira que o segundo momento em torno da média (variância³) seja mantido unitário. Com isto evitamos acoplamentos exchange negativos, o que representaria acoplamentos antiferromagnéticos. Na expressão 3.43, ϕ_k são $N/2$ fases aleatórias uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 2\pi]$, representando a fonte de desordem da série. $k = 1/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda das ondulações na sequência. O parâmetro α controla o grau de correlação da sequência. Para $\alpha = 0$, nós recuperamos uma distribuição ferromagnética aleatória de acoplamentos *exchange*.

3.3.3 Resultados

Natureza dos autoestados

Com o objetivo de caracterizar a distribuição espacial dos estados de 2 mágns, nós calculamos inicialmente a função participação [58, 166]:

$$P = \frac{1}{\sum_{n_1 < n_2} |f_{n_1, n_2}|^4} \quad (3.44)$$

Esta função nos fornece uma medida da porção do espaço onde a amplitude da função de onda difere significativamente de zero. Para entendermos melhor esta medida do grau de localização, lembremos que o numerador de 3.44 é igual a 1 para mantermos a normalização dos autoestados do Hamiltoniano ($\sum_{n_1, n_2} |f_{n_1, n_2}|^2$). Para uma cadeia pura, onde todos os estados são estendidos, as amplitudes de probabilidade são $f_{n_1, n_2} = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)/2}}$. A função participação neste caso é

$$P = \frac{1}{\sum_{n_1 < n_2} |f_{n_1, n_2}|^4} = \frac{1}{\sum_{n_1=1}^{N-1} \sum_{n_2=n_1+1}^N \frac{1}{[N(N-1)/2]^2}} = \frac{N(N-1)}{2} \quad (3.45)$$

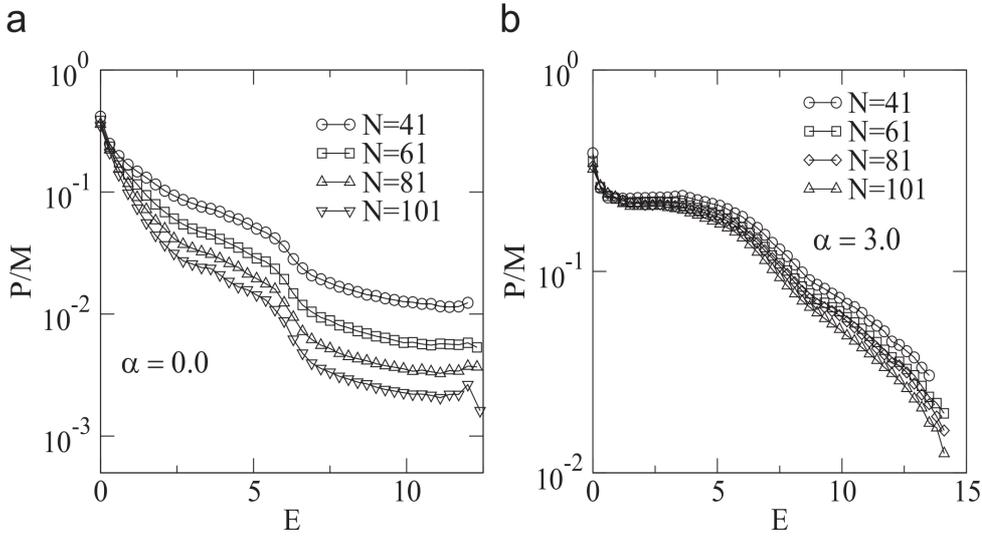
Como a função de onda estende-se por todos os sítios possíveis da cadeia, a participação é da dimensão do espaço de Hilbert. Vemos assim que P está relacionada com o número de estados possíveis (pares de sítios) com probabilidade não nula de haver desvios nos spins. Para funções de onda localizadas em uma região finita do sistema, P é finito no limite termodinâmico [58].

Como o algoritmo numérico requer a diagonalização de matrizes $(N(N-1)/2 \times N(N-1)/2)$, nós ficamos restritos ao cálculo de cadeias relativamente pequenas ($N = 21, 41, 81, 101$ spins). De modo a inferir sobre o limite das cadeias de infinito, nós empregamos uma análise de escala de tamanho finito. Além disso, devido a variável aleatória ϕ_k presente na distribuição dos acoplamentos exchange, nós realizamos uma média configuracional sobre o desordem - 8000 realizações para o menor tamanho de cadeia e 500 realizações para o maior.

Na figura 3.3 nós apresentamos os resultados para o número de participação reescalada $(P/M) \times \text{Energia } (E)$, sendo $M = N(N-1)/2$, calculados via diagonalização exata sobre

³Variância de uma variável aleatória é uma medida da sua dispersão estatística, indicando quão longe em geral os seus valores se encontram do valor esperado. No presente caso, a variância é determinada por $\Delta x = \langle x_n^2 \rangle - \langle x_n \rangle^2$.

Figura 3.3: Função participação reescalada $P/M \times Energia$, sendo $M = N(N - 1)/2$, para (a) $\alpha = 0.0$ e (b) $\alpha = 3.0$. O colapso dos dados observados no regime de baixa energia da cadeia fortemente correlacionada ($\alpha = 3.0$) é uma assinatura de dois estados estendidos de 2 mágnons.

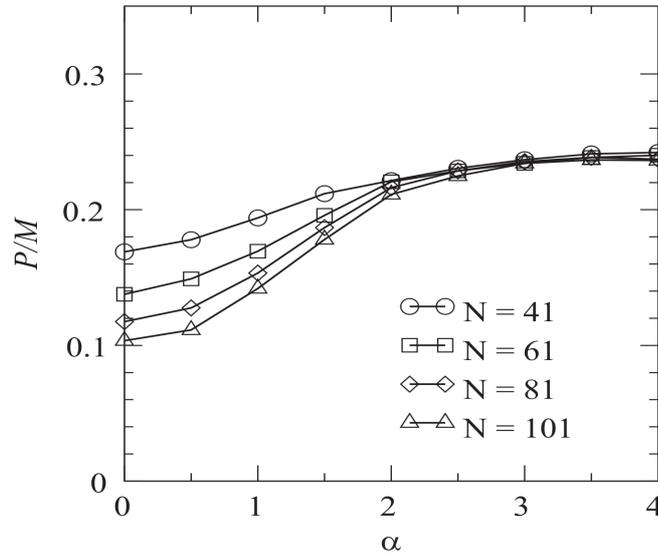


Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

cadeias com $N = 21, 41, 81, 101$ spins. Em (a) temos $\alpha = 0.0$, que representa ausência de correlação e (b) $\alpha = 3.0$. Para $\alpha = 0.0$ pode-se notar que os estados de altas energias são bem localizados, pois apresenta um pequeno comprimento de localização - número de participação pequeno quando comparado com o espaço de Hilbert. Podemos notar ainda que para $E = 0$ observa-se um colapso dos dados. Isto indica que os estados de baixas energias tem um comprimento de localização muito maior que os tamanhos das cadeias consideradas. Podemos notar também que a função participação apresenta um decréscimo considerável por volta de $E \simeq 6$, representando estados fortemente localizados. Esta é a escala de energia típica que delimita a extremidade da pseudo-banda abaixo da qual a densidade de estados são fortemente localizados. Para $\alpha = 3.0$, nota-se que a participação reescalada apresenta um colapso de dados bem definido no regime de baixa energia. Isto significa que P/M independe do tamanho da cadeia utilizada, ou seja, P é proporcional ao número total de estados possíveis (pares de sítios) com probabilidade não nula de haver desvios nos spins. Este resultado sugere a existência de um fase de estados estendidos de 2 mágnons.

Na figura 3.4 nós reunimos dados da participação reescalada P/M próximo na parte inferior da banda $E < 1$ para diversos valores de α (expoente que controla o grau de correlação do sistema). Fizemos isso para cadeias com $N = 21, 41, 81, 101$ spins. O colapso de dados para $\alpha > 2$ na figura 3.4 nos mostra que a função participação reescalada torna-se independente do tamanho da cadeia. Isto nos informa claramente que o sistema é governado por estados estendidos na parte inferior da banda para $\alpha > 2$. Vemos também, para $\alpha = 0.0$ e estados de baixa energia $E \simeq 0$ (ver figura 3.3a), que o colapso dos dados reflete estados de baixas energias com comprimento de localização muito maior que os tamanhos das cadeias consideradas.

Figura 3.4: Função participação reescalada $P/M \times \alpha$, sendo $M = N(N - 1)/2$, para cadeias com $N = 21, 41, 81, 101$ spins. O colapso dos dados observados para $\alpha > 2$ indica que o sistema é governado por estados estendidos.



Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

Dinâmica do pacote de onda de dois mágns

Tendo em vista a existência de regimes governados por estados localizados e estados estendidos na parte inferior da banda, nós resolvemos investigar o caráter dinâmico do sistema. Para isto, calculamos a evolução temporal através da integração numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Neste caso, o estado inicial $|\Phi(t=0)\rangle$ é um pacote de onda localizado nos sítios n_1 e n_2 , sendo $n_1 = \frac{N}{2} - d_0$ e $n_2 = \frac{N}{2} + d_0$, ou seja, os desvios ocorrem simetricamente em relação ao centro da cadeia.

A primeira quantidade analisada é a extensão espacial $\xi(t)$, definida por

$$\xi(t) = \sum_{n_1 < n_2} |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \sqrt{(n_1 - \langle n_1(t) \rangle)^2 + (n_2 - \langle n_2(t) \rangle)^2} \quad (3.46)$$

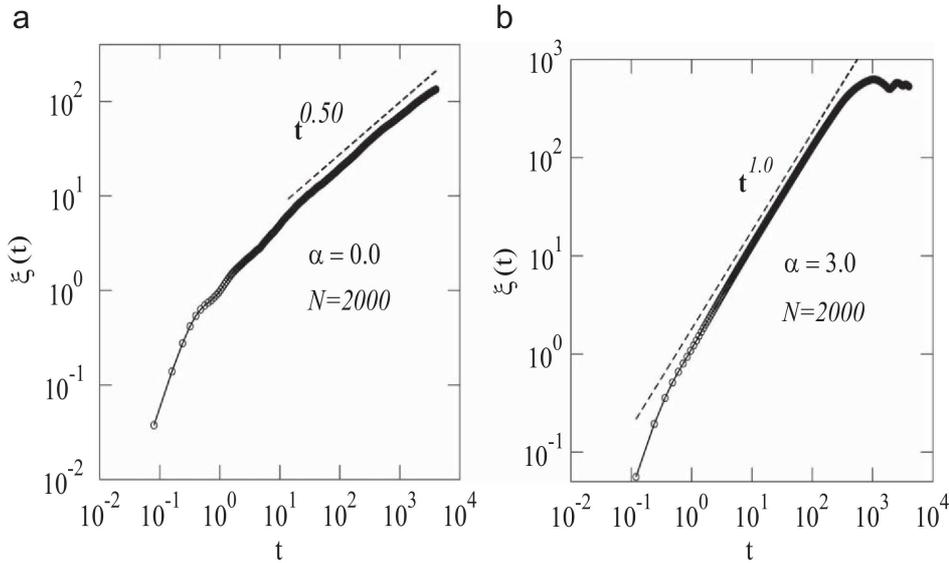
onde

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1 < n_2} n_i |f_{n_1, n_2}(t)|^2, \quad i = 1, 2 \quad (3.47)$$

Esta grandeza nos informa o quanto a função de onda se estende pela cadeia. Podemos interpretar a extensão espacial como a medida da largura da função de onda no plano $n_1 \times n_2$.

Na figura 3.5 nós apresentamos a extensão espacial para cadeias com $N = 2000$ spins, $d_0 = 2$, para (a) $\alpha = 0.0$ e (b) $\alpha = 3.0$, calculadas sobre uma média configuracional de 30 amostras distintas. Na ausência de correlações (ver figura 3.5a), a extensão do pacote de onda apresenta um comportamento assintótico tipo difusivo $\xi(t) \propto t^{0.5}$. Este comportamento concorda a literatura de 1 e 2 mágns em ferromagnetos desordenados sem qualquer correlação [151, 162]. Quando o sistema apresenta-se fortemente correlacionado (ver figura 3.5b), a extensão do pacote de onda apresenta um comportamento balístico

Figura 3.5: Extensão espacial $\xi(t) \times t$ para uma cadeia com $N = 2000$ spins e (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 3.0$. Em (a) podemos ver um comportamento assintótico difusivo $\xi(t) \propto t^{0.5}$. Em (b) podemos ver o pacote de onda apresentando um comportamento balístico $\xi(t) \propto t^{1.0}$.



Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

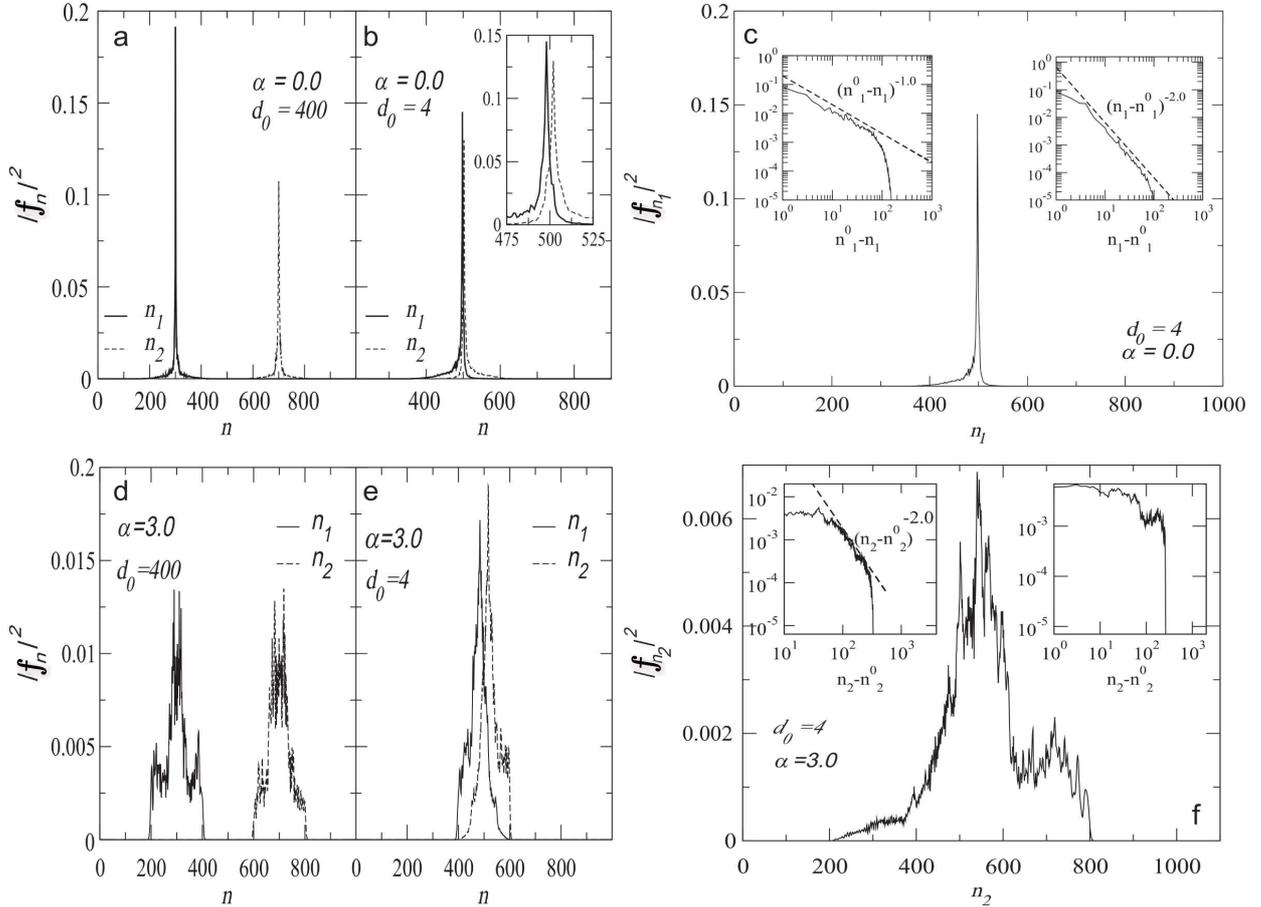
($\xi(t) \propto t^{1.0}$) antes de chegar nas extremidades da cadeia. Estes dois resultados reforçam o conceito da ausência de estados estendidos para sistemas com fraca ou nenhuma correlação e existência de uma fase de estados estendidos de dois mágnons no limite de forte correlações. Em outras palavras, podemos dizer que as correlações de longo alcance na distribuição dos termos de *exchange* é capaz de induzir a existência de uma fase de estados estendidos.

Os resultados apresentados até o presente momento não revelam uma influência direta da interação devido a não permissão da dupla excitação num único spin ($S = 1/2$). Em função disto, nós calculamos a forma assintótica do pacote de onda de 1 mágnon, ou a distribuição de probabilidade associada a 1 mágnon, definido como

$$|f_n|^2 = \sum_m |f_{n,m}(t)|^2 \quad (3.48)$$

Inicialmente, consideramos cadeias com $N = 1000$ spins, $\alpha = 0.0$, com (a) $d_0 = 200$ e (b,c) $d_0 = 4$. Como trata-se de um regime sem correlação na distribuição da desordem, sabe-se que o pacote de onda é localizado numa região finita da cadeia. Para excitações iniciais distantes (figura 3.6a), nenhuma distorção no pacote de onda de 1 mágnon é observada, visto que a desordem não correlacionada impede que os pacotes de onda de cada mágnon se alarguem o suficiente para que haja o *overlap* das funções de onda. Isto nos diz que a nenhuma interação efetiva entre os spins é observada. Na figura 3.6b, observa-se que o pacote de onda de 1 mágnon apresenta um aspecto assimétrico, com caudas tipo lei de potência com expoentes distintos para cada lado. O inset na figura 3.6b tem o objetivo de mostrar com maior detalhe este comportamento assimétrico. Em 3.6c nós apresentamos a distribuição de probabilidade espacial associada ao spin desviado da esquerda. Os insets

Figura 3.6: Distribuição assintótica do pacote de onda de 1 mágns em uma cadeia com $N = 1000$ spins (a,b,c) sem correlação na distribuição dos termos de exchange ($\alpha = 0.0$) e (d,e,f) fortemente correlacionados ($\alpha = 3.0$). O estado inicial das excitações dos spins são (a,d) $n_1 = \frac{N}{2} - 200$ e $n_2 = \frac{N}{2} + 200$ e (b,c,e,f) $n_1 = \frac{N}{2} - 4$ e $n_2 = \frac{N}{2} + 4$. Podemos notar que o pacote de onda exibe uma distribuição assimétrica para excitações iniciais próximas, com caudas tipo lei de potência com diferentes expoentes, o que reflete a interação efetiva entre os mágns.

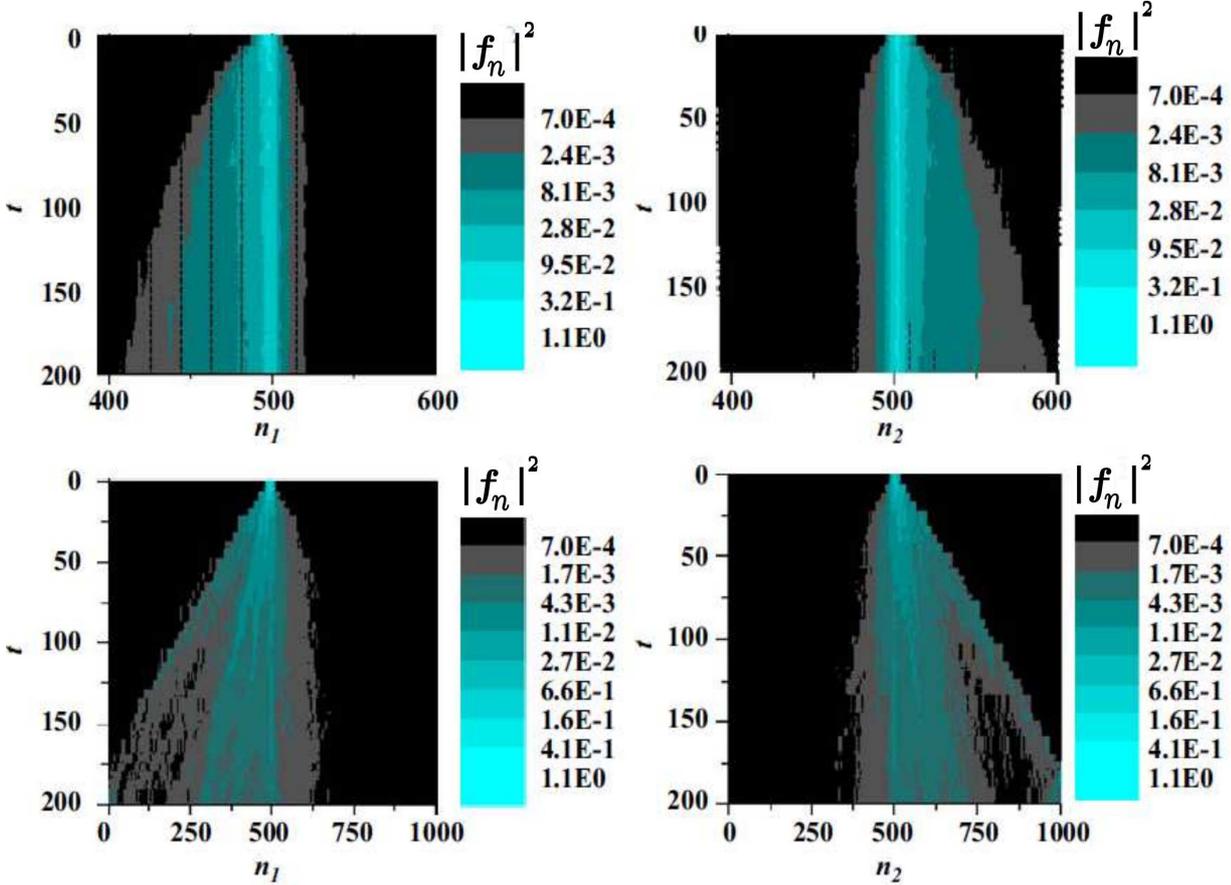


Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

desta figura apresentam o expoente da distribuição tipo lei de potência para cada cauda. O expoente maior do lado direito do pacote de onda reflete a repulsão cinemática entre as excitações. Esta repulsão cinemática impede o alargamento livre do pacote de onda de 1 mágns ao longo da região predominantemente ocupada pelo outro mágns, provocando assim um maior decaimento na distribuição de probabilidade espacial.

Na presença de desordem fortemente correlacionada ($\alpha = 3.0$), a interação efetiva também é responsável por um aspecto assimétrico do pacote de onda de um mágns (ver figuras 3.6d,e,f). Neste caso, devemos lembrar que o sistema é governado por estados estendidos, de maneira que a largura dos pacotes de onda de cada mágns torna-se muito mais largo que no caso em que não correlacionado (caso anterior $\alpha = 0.0$, ver figuras 3.6a,b,c). Na figura 3.6d, não observamos um aspecto assimétrico porque, no tempo observado, os pacotes de onda ainda não se alargaram o suficiente para haja o *overlap* das funções de onda de cada mágns. Na figura 3.6e, como as excitações iniciais apresentam uma pequena distância, a repulsão cinemática entre os mágns é facilmente observada,

Figura 3.7: Evolução temporal da função de onda de cada mágnon ($|f_n(t)|^2 \times n \times t$) em uma cadeia com $N = 1000$ spins com termos de exchange não correlacionados ($\alpha = 0.0$) - gráficos superiores; e fortemente correlacionados ($\alpha = 3.0$) - gráficos inferiores. O estado inicial das excitações dos spins são $n_1 = \frac{N}{2} - 2$ e $n_2 = \frac{N}{2} + 2$. Para $\alpha = 0.0$ uma porção finita do pacote fica presa ao spin excitado inicial. Para $\alpha = 3.0$ o pacote de onda apresenta um amplo alargamento para o lado livre de interação com outro mágnon. Em ambos os casos é evidente a repulsão entre os mágnons.

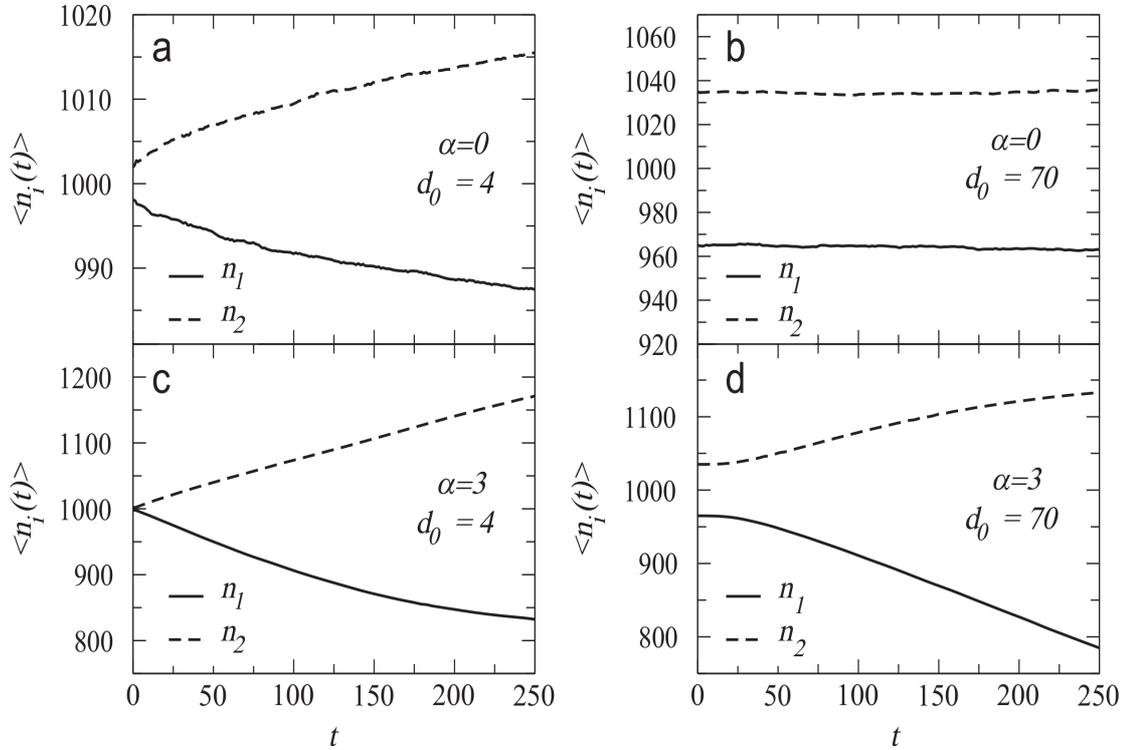


Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

refletindo um caráter assimétrico dos pacotes de onda de cada um dos mágnons. Na figura 3.6f nós apresentamos a distribuição de probabilidade espacial associada ao spin desviado da direita. Podemos notar que o decaimento quadrático observado no caso anterior (3.6c), para o lado em que houve a interação entre os mágnons, também é observado. No outro lado, como não há interação com outro mágnon, nenhum regime tipo lei de potência é estabelecido. Os pacotes de onda apresentam um aspecto acentuado que sinaliza um frente de onda. A estrutura observada nesses pacotes de onda reflete a natureza aleatória básica dos termos de exchange, que promovem um espalhamento aleatório do pacote de onda.

O comportamento assimétrico da evolução temporal do pacote de onda é melhor observado ao plotarmos o gráfico da *distribuição de probabilidade espacial associada a cada spin* ($|f_n(t)|^2$) \times *sítios da rede* (n) \times *tempo* (t) (ver figura 3.7). Os cálculos realizados para esta figura foram realizados para uma cadeia de $N = 1000$ spins, $d_0 = 4$, $\alpha = 0.0$ (gráficos

Figura 3.8: Evolução temporal do centroide de ambos os mágns ($\langle n_1(t) \rangle$ e $\langle n_2(t) \rangle$) em uma cadeia com $N = 2000$ spins, $d_0 = 4$ e $d_0 = 70$ com $\alpha = 0.0$ e $\alpha = 3.0$. Nota-se que a interação entre os mágns é responsável por uma repulsão entre os mágns, sugerido pelo aumento da distância dos centroides.



Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

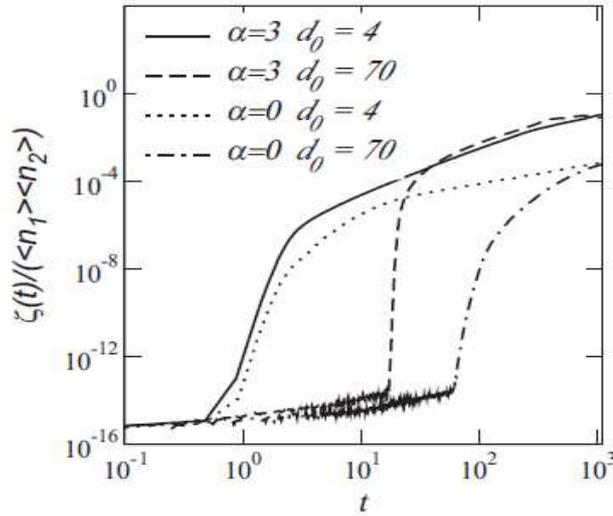
superiores) e $\alpha = 3.0$ (gráficos inferiores). Ao observarmos os gráficos fica ainda mais evidente o papel da interação cinemática entre os spins. A interação efetiva entre os spins inibe a alargamento do pacote de onda através da região ocupada pelo outro pacote de onda de 1 mágno, estabelecendo uma assimetria na distribuição de probabilidade espacial de 1 mágno. Em função do comportamento do sistema como isolante, para $\alpha = 0.0$ (gráficos superiores), o pacote de onda se alarga muito menos que no sistema fortemente correlacionado $\alpha = 3.0$.

Embora seja evidente que a interação entre os mágns faça com que o pacote de onda apresente um comportamento assimétrico, devido a não propagação do mágno na região ocupada pelo outro pacote de onda, nós calculamos a evolução temporal do centroide

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1 < n_2} n_i |f_{n_1, n_2}(t)|^2, \quad i = 1, 2 \quad (3.49)$$

de ambos os mágns ($\langle n_1(t) \rangle$ e $\langle n_2(t) \rangle$) em uma cadeia com $N = 2000$ spins, $d_0 = 4$ e $d_0 = 70$ e $\alpha = 0.0$ e $\alpha = 3.0$ (ver figura 3.8). Nota-se que a interação é responsável por uma repulsão entre os mágns, indicado pelo aumento da distância dos centroides (ver figuras 3.8a,c,d). Em (a) observa-se a repulsão instantânea entre os mágns, assim como em (c). O platô inicial em (d) é devido o não *overlap* das funções de onda. Isto fica mais evidente em (d), onde não observa-se a repulsão entre os mágns, visto que a

Figura 3.9: Dependência temporal da função correlação entre os dois mágnons em uma cadeia com $N = 2000$ spins, $d_0 = 4$ e $d_0 = 70$ com $\alpha = 0.0$ e $\alpha = 3.0$. A descontinuidade na função correlação assinala a colisão entre os mágnons, o que resulta posteriormente numa repulsão entre os mesmos.



Fonte: W.S. Dias, 2009 (referência [136]).

distribuição não correlacionada resulta num pequeno alargamento dos pacotes, inibindo o *overlap* a grandes distâncias.

Os últimos resultados revelam uma competição entre a propagação do mágnon, seja ela balística (desordem fortemente correlacionada) ou difusiva (desordem fracamente correlacionada), e a repulsão cinemática entre os mágnons. Na figura 3.9 são apresentados dados da função correlação

$$\zeta(t) = \langle n_1(t)n_2(t) \rangle - \langle n_1(t) \rangle \langle n_2(t) \rangle \quad (3.50)$$

normalizada ($\zeta(t)/\langle n_1(t) \rangle \langle n_2(t) \rangle$) para os sistemas apresentados anteriormente (ver figura 3.8). Os platôs iniciais representam o regime onde os pacotes de onda não apresentam um *overlap*, enquanto que o rápido aumento (descontinuidade da derivada) da função estabelece o momento em que o *overlap* inicia-se. Evidentemente, quando a distância entre as excitações iniciais é pequena ($d_0 = 4$), o tempo necessário para a colisão é menor que o caso em que as excitações iniciais são mais distantes ($d_0 = 70$). Entretanto, ao confrontarmos os dados de $\alpha = 0.0$ (desordem descorrelacionada) e $\alpha = 3.0$ (desordem fortemente correlacionada), nota-se que o tempo necessário para a colisão é menor para o último. É óbvio que este aspecto está associado ao caráter metálico do sistema quando $\alpha = 3.0$. Esta diferença entre os aspectos isolantes e metálicos do sistema também reflete no grau de correlação do sistema, pois nota-se que o fraco aumento na função correlação está associado a propagação difusiva dos mágnons.

4

Dois elétrons interagentes em cadeias puras e com desordem

Os estudos que serão apresentados neste capítulo foram direcionados a dois elétrons interagentes em sistemas unidimensionais. Consideramos que a interação entre os dois elétrons de spins opostos é de origem coulombiana e *on-site*, ou seja, a interação ocorre somente quando os dois elétrons estão no mesmo sítio atômico. Avaliamos os estados eletrônicos e o comportamento dinâmico dos pacotes de onda eletrônico em cadeias cristalinas e com desordem correlacionada de longo alcance na distribuição dos potenciais. Isto é possível mediante as soluções das equações de Schrödinger independente e dependente do tempo, respectivamente. Além disso, em ambas as cadeias, nós investigamos a influência de um campo elétrico externo constante sobre o comportamento dinâmico dos pacotes de onda. Em resumo, todos os nossos resultados sugerem que a existência dos estados ligados de dois elétrons apresenta um papel significativo sobre os estados eletrônicos e comportamento dinâmico do sistema. Mostraremos a coexistência de auto estados estendidos e localizados próximos ao centro da banda, quando o sistema possui desordem na distribuição dos potenciais. A interação promove uma distribuição dos espaçamentos de níveis tipo Poisson independente do grau de interação. Além disso, dependendo da condição inicial dos elétrons, a interação elétron-elétron promove o acúmulo de uma parte finita do pacote de ondas no sítio inicial, além de ser responsável por um movimento correlacionado dos dois elétrons. Os trabalhos aqui apresentados foram publicados em 2010 nas revistas *Physics Letters A* e *Physical Review B*, referências [167] e [168] respectivamente (ver anexos C e D).

4.1 Dois elétrons interagentes em sistemas 1D

4.1.1 Equação de Schrödinger

Como apresentado no capítulo 2, a interação entre elétrons possui grande relevância no comportamento de sistemas eletrônicos, podendo induzir também uma transição metal-isolante. Ao tratarmos de sistemas com baixa densidade eletrônica, mais especificamente dois elétrons, alguns estudos tem revelado que embora simplificado, o modelo resgata efeitos físicos importantes contidos em problemas de alta densidade eletrônica

[119, 120, 121, 122]. Como principal exemplo temos o pioneiro trabalho de Shepelyansk que observou o enfraquecimento da localização de Anderson em um sistema de duas partículas interagentes em um meio desordenado [10], cujo resultado tem sido observado também em sistemas muitas partículas [119, 120, 121, 122, 132, 133, 134, 135].

Sistemas de baixa densidade eletrônica apresentando alguns aspectos físicos característicos de sistemas de muitos elétrons contribui muito para o desenvolvimento da área de transporte eletrônico. O principal motivo estão relacionados as dificuldades inerentes ao problema multieletrônico. Uma delas está na origem não perturbativa do problema, uma vez que, em geral, o termo de interação não é pequeno o suficiente para ser um parâmetro na expansão perturbativa. Outra dificuldade diz respeito ao esforço computacional, visto que o número de estados eletrônicos cresce exponencialmente com o tamanho do sistema.

Direcionando os nossos esforços ao estudo de sistemas com dois elétrons interagentes em sistemas unidimensionais, tendo em vista o hamiltoniano de Anderson (expressão 2.5) e o hamiltoniano de Hubbard (expressão 2.20) podemos perceber que o hamiltoniano de dois elétrons interagentes numa rede unidimensional é dada por

$$H = J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \epsilon'_n c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N U' c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} \quad (4.1)$$

Neste hamiltoniano, J representa o termo de *hopping* de primeiros vizinhos, ϵ'_n representa a energia para o sítio n . O parâmetro U' representa a energia de interação coulombiana local (*on-site*) de Hubbard entre os dois elétrons. Assim como as expressões 2.5 e 2.20, utilizamos a representação de segunda quantização, onde $c_{i,\sigma}^{\dagger}$ e $c_{i,\sigma}$ são, respectivamente, os operadores criação e aniquilação de um elétron com spin $\sigma = \pm 1/2$ para o sítio i .

Dentro do contexto de sistemas com dois elétrons interagentes, a literatura apresenta duas abordagens distintas para o estudo das propriedades de transporte eletrônico. Uma abordagem considera os elétrons com mesmo estado de spin, de maneira que a função de onda dos dois elétrons deve ser anti-simétrica em relação a troca das partículas ¹ [123, 169, 170, 171]. A outra abordagem trata os elétrons como distinguíveis pelo spin [10, 130, 172, 173, 174, 175]. Os aspectos físicos característicos do problema de duas partículas interagentes são apresentados em ambas as abordagens. Sendo assim, consideramos em nossos estudos que a parte espacial da função de onda é resultado do produto direto das funções de onda de cada elétron

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \phi_A(x_1)\phi_B(x_2) \quad (4.2)$$

Desta maneira, sendo a nossa cadeia constituída de N sítios, os auto-estados do Hamiltoniano no sub-espaço gerado por todos os estados de posição dos dois elétrons, é dado por

$$|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1s}} \sum_{n_{2s'}} f_{n_{1s}, n_{2s'}} |\psi(n_{1s}, n_{2s'})\rangle \quad (4.3)$$

ou seja, nosso sub-espaço será expandido em N^2 funções de onda. Nesta última expressão,

¹Esta condição é imposta pelo Postulado da Simetrização da Mecânica Quântica.

$|\psi(n_{1s}, n_{2s'})\rangle$ representa um elétron com spin s no sítio n_1 e outro com spin s' para o sítio n_2 . Utilizando notação de segunda quantização, temos nossos kets base escritos como

$$|\psi(n_{1s}, n_{2s'})\rangle = c_{n_1, \uparrow}^\dagger c_{n_2, \downarrow}^\dagger |0, 0\rangle \quad (4.4)$$

onde $|0, 0\rangle$ é o estado de vácuo, ou seja, o número de ocupação dos estados de um elétron é zero. Tomamos n_1 e n_2 como o sítio de ocupação dos elétrons 1 (spin *up* \uparrow) e 2 (spin *down* \downarrow) respectivamente.

Os aspectos estacionários do problema são obtidos após resolvermos a equação de Schrödinger independente do tempo

$$H|\Psi(n_1, n_2)\rangle = E|\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (4.5)$$

De posse do Hamiltoniano 4.1, reescrevemos a última equação como:

$$\begin{aligned} H|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} (c_{n+1, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma} + c_{n, \sigma}^\dagger c_{n+1, \sigma})}_{H_1} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \epsilon'_n c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma}}_{H_2} |\Psi(n_1, n_2)\rangle + \underbrace{\sum_{n=1}^N U' c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow}}_{H_3} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde foi feita a identificação de cada termo do hamiltoniano para facilitar os cálculos posteriores da resolução da equação de Schrödinger.

Com o objetivo de encontrar uma relação de recorrência para este problema, tomamos inicialmente os dois elétrons no mesmo orbital atômico, ou seja, $n_1 = n_2$. Assim, para H_1 , temos:

$$\begin{aligned} H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \\ &+ c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow}) c_{n_{1\uparrow}}^\dagger c_{n_{1\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle \end{aligned} \quad (4.7)$$

Nesta última, o somatório em σ foi desfeito, explicitando os spins *up* (\uparrow) e *down* (\downarrow) de cada elétron. Devido a atuação dos operadores de criação e aniquilação de férmions, temos

$$\begin{aligned} H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \\ &+ c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\ H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle \\ &+ |n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow}\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right. \\
&\quad \left. + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle \right)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Para H_2 :

$$\begin{aligned}
H_2|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \epsilon'_n (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
H_2|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \epsilon'_n (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\
H_2|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\epsilon'_{n_1} + \epsilon'_{n_1}) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\
H_2|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} 2\epsilon'_{n_1} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Fazendo agora os cálculos para H_3 temos:

$$H_3|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N U' c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \tag{4.10}$$

Uma vez que a energia de interação de coulombiana é *on-site*, a equação 4.10 é reescrita como

$$H_3|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} U' |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \tag{4.11}$$

somente se $n_2 = n_1$.

De posse das equações 4.11, 4.9 e 4.8, reescrevemos a parte da equação de Schrödinger independente do tempo para elétrons dispostos em sítios iguais ($n_2 = n_1$) como:

$$\begin{aligned}
E|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[J \left(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle \right) + (2\epsilon'_{n_1} + U') |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right]
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Considerando agora que $n_2 = n_1 + 1$. Para H_1 temos:

$$\begin{aligned}
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
&\quad + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) c_{n_{1\uparrow}}^\dagger c_{n_{1\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Fazendo novamente uso dos operadores de criação e aniquilação de férmions temos:

$$\begin{aligned}
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
&\quad + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle \\
&\quad + |n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle) \\
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \right. \\
&\quad \left. + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right)
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Para H_2 temos:

$$\begin{aligned}
H_2|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \epsilon'_n (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\epsilon'_{n_1} + \epsilon'_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Como visto anteriormente, H_3 possui o termo de interação *on-site* de Hubbard, existindo somente para elétrons no mesmo sítio. Desta forma, concluímos através das equações 4.14 e 4.15 que a parte da equação de Schrödinger para $n_2 = n_1 + 1$ é:

$$\begin{aligned}
E|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[J \left(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) + (\epsilon'_{n_1} + \epsilon'_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right]
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Tomando agora que $n_2 = n_1 + 2$, para H_1 :

$$\begin{aligned}
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
&\quad + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow}\rangle \\
&\quad + |n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle) \\
H_1|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \right. \\
&\quad \left. + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right)
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Para H_2 :

$$\begin{aligned}
H_2|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \epsilon'_n (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\epsilon'_{n_1} + \epsilon'_{n_1+2}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Sabendo que H_3 não é válido para este caso e tendo em mãos as equações 4.17 e 4.18,

escrevemos a parte da equação de Schrödinger para $n_2 = n_1 + 2$ como:

$$\begin{aligned}
E|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[J \left(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \right) \right. \\
&\quad + \left. |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) \\
&\quad + \left. (\epsilon'_{n_1} + \epsilon'_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \right] \quad (4.19)
\end{aligned}$$

Reunindo as equações 4.12, 4.16 e 4.19 e substituindo nestas as grandezas adimensionais

$$\epsilon_n = \frac{\epsilon'_n}{J}, \quad U = \frac{U'}{J} \quad e \quad \mathcal{E} = \frac{E}{J} \quad (4.20)$$

temos as equações de Schrödinger dadas por

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_1} = f_{n_1+1, n_1} + f_{n_1, n_1+1} + f_{n_1-1, n_1} + f_{n_1, n_1-1} + (2\epsilon_{n_1} + U)f_{n_1, n_1} \quad (4.21)$$

para $n_1 = n_2$,

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_1+1} = f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + f_{n_1-1, n_1+1} + f_{n_1, n_1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1})f_{n_1, n_1+1} \quad (4.22)$$

para $n_2 = n_1 + 1$ e

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_1+2} = f_{n_1+1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+3} + f_{n_1-1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2})f_{n_1, n_1+2} \quad (4.23)$$

para $n_2 = n_1 + 2$. A análise desta últimas três expressões nos permite facilmente perceber que a relação de recorrência para o problema em questão é dada por

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1, n_2})f_{n_1, n_2} \quad (4.24)$$

Esta relação de recorrência pode ser utilizada para a obtenção matricial do hamiltoniano na base $|\psi(n_1, n_2)\rangle$, que representa a ocupação do elétron 1 (spin *up* \uparrow) no sítio n_1 e o elétron 2 (spin *down* \downarrow) no sítio n_2 . Por exemplo, ao considerarmos uma cadeia com $N = 3$ sítios, temos como estados possíveis:

$$|\psi(1, 1)\rangle, |\psi(1, 2)\rangle, |\psi(1, 3)\rangle, |\psi(2, 1)\rangle, |\psi(2, 2)\rangle, |\psi(2, 3)\rangle, |\psi(3, 1)\rangle, |\psi(3, 2)\rangle, |\psi(3, 3)\rangle$$

Desta forma, com auxílio da relação de recorrência 4.24, podemos escrever o hamiltoniano na sua forma matricial como

$$H = \begin{array}{c|cccccccccc}
& |\phi_{1,1}\rangle & |\phi_{1,2}\rangle & |\phi_{1,3}\rangle & |\phi_{2,1}\rangle & |\phi_{2,2}\rangle & |\phi_{2,3}\rangle & |\phi_{3,1}\rangle & |\phi_{3,2}\rangle & |\phi_{3,3}\rangle \\
\langle\phi_{1,1}| & 2\epsilon_1 + U & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\langle\phi_{1,2}| & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\langle\phi_{1,3}| & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
\langle\phi_{2,1}| & 1 & 0 & 0 & \epsilon_2 + \epsilon_1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
\langle\phi_{2,2}| & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_2 + U & 1 & 0 & 1 & 0 \\
\langle\phi_{2,3}| & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_2 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 \\
\langle\phi_{3,1}| & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 & 1 & 0 \\
\langle\phi_{3,2}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_3 + \epsilon_2 & 1 \\
\langle\phi_{3,3}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_3 + U
\end{array} \quad (4.25)$$

Devemos notar que num sistema de 2 elétrons distinguíveis num sistema unidimensional temos o N^2 configurações possíveis. Desta forma, as matrizes do problema de dois elétrons possuem dimensão $N^2 \times N^2$.

O análise do caráter estacionário do problema é possível através dos autovalores e autovetores obtidos por diagonalização numérica direta. Assim como no problema apresentado no capítulo anterior, utilizamos rotinas Lapack [164] em nossos cálculos.

Além dos aspectos estacionários, podemos investigar os aspectos dinâmicos do sistema. Neste caso, resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (4.26)$$

onde H é o hamiltoniano 4.1 e $|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2}(t) |\psi(n_1, n_2)\rangle$, onde $|\psi(n_1, n_2)\rangle$ é o estado em que os elétrons 1 e 2 estão, respectivamente, nos sítios n_1 e n_2 ($|\psi(n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow})\rangle = c_{n_{1\uparrow}}^\dagger c_{n_{2\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle$). Uma vez que a expressão 4.24 foi obtida de $H|\Psi\rangle$, nota-se facilmente que equação de Schrödinger dependente do tempo em termos dos coeficientes $f_{n_1, n_2}(t)$ é dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2}(t) = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2} \quad (4.27)$$

A equação acima pode ser resolvida através de algoritmo de Runge-Kutta [163], obtendo assim as amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado. Visto que um dos nossos objetivos é investigar também a influência de um campo elétrico externo sobre o comportamento dinâmico dos dois elétrons, apresentaremos a seguir os aspectos inerentes a presença deste campo.

4.1.2 Campo Elétrico

Como vimos na seção 2.2, Felix Bloch mostrou que as funções de onda eletrônicas em um potencial periódico, em um cristal, são ondas planas moduladas periodicamente (ver equação 2.3). Devido a esta estrutura periódica existem regiões em que as energias são permitidas (bandas de energia) e regiões em que as energias são proibidas (*gaps* de energia) [43]. Uma importante diferença entre a dinâmica de um elétron numa rede cristalina e um elétron livre é o fato do espaço \mathbf{k} ser dividido em zonas de Brillouin e dentro destas zonas existir uma dependência da energia em relação ao vetor de onda. Assim, para um elétron livre no espaço sobre influência de um campo elétrico \mathbf{E} constante, o movimento descrito é constantemente acelerado em uma direção definida por $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$. Entretanto, para um elétron em uma banda cristalina sob influência de um campo elétrico \mathbf{E} constante, a função de onda eletrônica apresenta o que conhecemos da literatura como *oscilações de Bloch* [176, 177, 178, 179, 180].

Podemos entender o fenômeno através do modelo semiclássico. Este modelo consiste de obter as equações de movimento para a posição \mathbf{r} e o momento \mathbf{p} de cada elétron na presença de um campo externo através do formalismo clássico de Hamilton e depois “quantizar” o momento do elétron. A função Hamiltoniana Clássica $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ pode então

ser “quantizada” através da substituição \mathbf{p} por $\hbar\mathbf{k}$ [181, 182]. Assim, pelas equações de Hamilton temos

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \quad (4.28)$$

Manipulando a primeira equação temos

$$\begin{aligned} \mathbf{v} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} [\epsilon(\mathbf{p}/\hbar) + V(\mathbf{r})] \\ &= \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p}/\hbar)}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.29)$$

A equação anterior mostra a velocidade de um pacote de onda, também conhecida como velocidade de transmissão de energia no meio ou velocidade de grupo. Vemos que a velocidade é proporcional a inclinação da curva de energia em relação a \mathbf{k} .

A segunda equação em 4.28 pode ser escrita como

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (4.30)$$

Porém, se $V(\mathbf{r})$ é a energia potencial de um elétron num campo fixo eletrostático, o lado direito da equação 4.30 é simplesmente a força clássica agindo sobre o elétron. Em nosso caso trata-se da força oriunda do campo elétrico \mathbf{E} , ou seja,

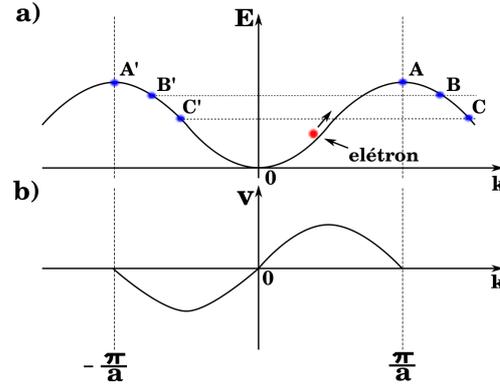
$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\mathbf{E} \quad (4.31)$$

Esta equação nos mostra que variação temporal de \mathbf{k} é proporcional a força elétrica. Esta última equação é imediatamente reduzida à

$$\mathbf{k}(t) = \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar}t + \mathbf{k}_0 \quad (4.32)$$

Para elétrons livres, a relação entre energia e momento é dada pela parábola clássica $\epsilon = p^2/2m$. Entretanto, como o nosso elétron está numa banda de energia, as previsões são bem diferentes. Para entendermos a dinâmica de um elétron numa banda sob influência de um campo elétrico, consideremos uma banda de condução 1d como na figura 4.1. Através da última expressão, vemos que o vetor de onda \mathbf{k} aumenta uniformemente com o tempo. Assim, a medida que t aumenta, o elétron atravessa o espaço \mathbf{k} a uma taxa uniforme (ver representação na figura 4.1a). O elétron, partindo de $\mathbf{k} = 0$, por exemplo, move-se pela banda até chegar ao ponto A . O ponto A é idêntico ao ponto A' , entretanto são separados por um vetor da rede recíproca $2\pi/a$. Tendo em mente o esquema de zona reduzida e a periodicidade da função $\epsilon(\mathbf{k})$, nós podemos descrever a mudança do vetor \mathbf{k} com o tempo como um processo periódico no qual o ponto \mathbf{k} vai de A' até A , reaparecendo em A' e repetindo o ciclo novamente. Associada a este fenômeno, existe uma oscilação no espaço real, uma vez que a velocidade (expressão 4.29) está periodicamente mudando de sinal.

Figura 4.1: Dinâmica de um elétron sobre influência de um campo elétrico. Relação a) energia-vetor de onda \mathbf{k} ; e b) velocidade-vetor de onda \mathbf{v} .



Fonte: Autor, 2011.

A figura 4.1 mostra a velocidade do elétron ao longo do eixo \mathbf{k} . Partindo de $\mathbf{k} = 0$, a velocidade aumenta a medida que o tempo passa. Após chegar ao máximo, ela diminui e então desaparece para a extremidade da banda. Assim, o elétron retorna e adquire uma velocidade negativa, repetindo o processo. Esta velocidade discutida aqui é a velocidade no espaço real, ou seja, o velocidade física usual.

O período das oscilações é facilmente encontrado. Por simplicidade, admitamos que o vetor de onda \mathbf{k} esteja inicialmente em A' , ou seja

$$\mathbf{k}(0) = \mathbf{k}_0 = -\frac{\pi}{a} \quad (4.33)$$

Especificando $t_{ocil.}$ como o tempo que o vetor \mathbf{k} gasta chegar em π/a , temos

$$\mathbf{k}(t_{ocil.}) = \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar}t_{ocil.} + \mathbf{k}_0 \quad (4.34)$$

Como a diferença entre os pontos A' e A é justamente um vetor de rede recíproca, fazemos

$$\begin{aligned} \mathbf{k}(t_{ocil.}) - \mathbf{k}(0) &= \frac{2\pi}{a} = \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar}t_{ocil.} \\ t_{ocil.} &= \tau = \frac{2\pi\hbar}{(-e)Ea} \end{aligned} \quad (4.35)$$

Desta última obtemos a frequência de oscilação

$$\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \frac{(-e)Ea}{\hbar} \quad (4.36)$$

Podemos encontrar também a largura do segmento no qual se dá oscilação do elétron. Para isso tomemos na equação 4.29, ou seja

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad (4.37)$$

Sabendo que as funções \mathbf{r} , $\epsilon(\mathbf{k})$ e \mathbf{k} são contínuas no intervalo $[-\pi/a, \pi/a]$

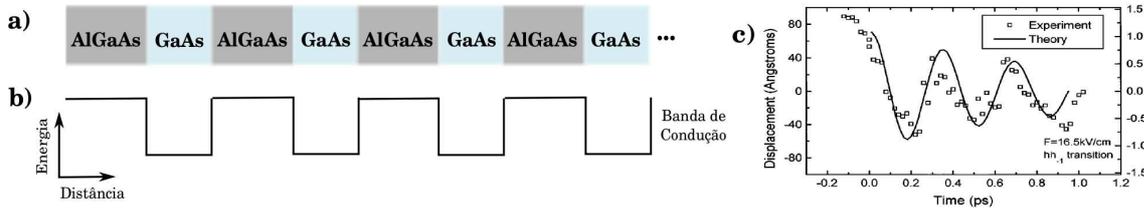
$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_0 &= \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} dt \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{dt}{d\mathbf{k}} d\mathbf{k} = -\frac{1}{(-e)E} [\epsilon(\mathbf{k}(t)) - E(\mathbf{k}(0))] \end{aligned} \quad (4.38)$$

Nesta expressão, é evidente a amplitude de oscilação é $r_{max} = W/eE$, onde W é a largura da banda. Após um ciclo, $t = \tau$ (expressão 4.35), o elétron retorna a sua posição original.

Para um caso **ideal** como descrito acima, estando o elétron livre de impurezas e imperfeições na rede, além de vibrações térmicas, é fácil determinar a frequência de oscilação e amplitude de oscilação. Por exemplo, tomando um sistema cujo espaçamento de rede fosse 5 \AA uma largura de banda com 1 eV , um campo elétrico de 10^2 V/cm poderia localizar elétrons em uma região de $\approx 100 \text{ \mu m}$ e fazê-los oscilar a uma frequência de $\omega \approx 1 \text{ GHz}$. O período de oscilação para este caso seria $\tau \approx 5 \text{ ns}$. Entretanto, num sistema **real**, interação com fônons e impurezas presentes no cristal impedem a visualização do fenômeno. Sendo o tempo de relaxação (tempo médio entre colisões) da ordem de $\approx 10^{-14} \text{ s}$, o elétron sofre um enorme número de colisões (em torno de 10^6) no tempo de um ciclo, suprimindo o fenômeno oscilatório.

Do ponto de vista experimental, as oscilações de Bloch foram primeiramente observadas após o advento das super-redes semicondutoras [183, 184, 185, 186]. A técnica de crescimento de cristais atômicamente controlados mostrou-se extremamente eficaz na construção destas estruturas artificiais. Uma super-rede semicondutora é formada pelo crescimento periódico e alternado de camadas de dois semicondutores com *gaps* de energia diferentes, como representado na figura 4.2a. Devido a estes *gaps* de energia diferentes, surge uma descontinuidade de energia nas interfaces entre duas camadas adjacentes (ver figura 4.2b). Ao compararmos esta estrutura de potencial ao potencial periódico num cris-

Figura 4.2: (a) Super-rede semicondutora é formada pelo crescimento periódico e alternado de camadas de dois semicondutores *GaAs* e *AlGaAs*. (b) Perfil da banda de condução da super-redes. (c) Deslocamento espacial de elétrons em super-redes semicondutoras.



Fonte: (a) e (b) Autor, 2011; (c) Lyssenko, 1997 (referência [187]).

tal natural, podemos dizer que os poços de potencial comportam-se como macro-átomos numa rede cristalina com um parâmetro de rede maior, dando origem o nome super-redes cristalinas. Esta disposição periódica dos poços na super-rede dá origem a estados eletrônicos estendidos, da mesma maneira observada para átomos numa rede cristalina [45].

Duas importantes características destas estruturas artificiais é o alto grau de perfei-

ção da rede o parâmetro de rede bem maior que o observado em cristais. A primeira característica está associada ao tempo de relaxação maior que o observado em cristais, enquanto que a segunda característica está associada ao período de oscilação (ver equação 4.35). Com o maior grau de pureza e parâmetro de rede podendo chegar a centenas de Angstroms, a observação experimental do fenômeno tornou-se factível (ver figura 4.2c). Entretanto, o surgimento de outros sistemas artificiais também possibilitou a observação de oscilações de Bloch, como átomos [188, 189] e/ou condensados de Bose-Einstein [190, 191, 192] aprisionados em redes ópticas.

A campo teórico também tem sido bastante explorado. A coexistência de desordem e campo elétrico constante revela que a influência do campo sobre a localização é muito maior que a influência da desordem [193, 194]. A localização do pacote de onda eletrônico na presença do campo elétrico é conhecido como localização dinâmica. Entretanto, este aprisionamento do pacote de onda nem sempre resulta em oscilações coerentes com frequência bem definida, como apresentado na equação 4.36. Na presença de desordem as oscilações são fortemente amortecidas [195, 196, 197] e o pacote de onda pode apresentar um comportamento oscilatório tipo ruído-branco [198]. Entretanto, para sistemas não puros que apresentam fases extendidas, quando o sistema apresenta-se nesta fase, observa-se que a desordem não destrói a coerência das oscilações de Bloch [198, 199, 200].

O problema envolvendo interação entre elétrons e campo elétrico também tem sido investigado [201, 202, 203]. O formalismo de muitos corpos para a teoria de campo médio dinâmico foi estendida para tratar problemas de não equilíbrio, tratando-se do hamiltoniano de Bose-Hubbard sob a ação complementar de um campo estático. Foi mostrado como as oscilações de Bloch extingiram-se pelas interações elétron-elétron e como suas características mudam drasticamente para um isolante de Mott [201]. Outro trabalho sobre o modelo de Bose-Hubbard sob influência de um campo estático revela uma assinatura característica de caos quântico. Isso induz a decaimento irreversível de oscilações de Bloch de átomos frios carregados em uma rede óptica [202]. Embora, de maneira geral, a interação favoreça a destruição das oscilações de Bloch, foi relatado recentemente para um sistema interagente de átomos frios que as oscilações de Bloch são persistentes se a interação é modulada harmonicamente com frequência adequada e fase [203].

Interessados em investigar o comportamento de dois elétrons sob influência de um campo elétrico uniforme e constante, adicionamos ao nosso Hamiltoniano 4.1 um termo que representa a influência de um campo elétrico constante e uniforme sobre as partículas por toda a cadeia. Assim, temos o Hamiltoniano

$$H = J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} (\epsilon'_n + eF a \mathbf{n}) c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N U' c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} \quad (4.39)$$

sendo F o campo elétrico externo, e é a carga da partícula, a o parâmetro de rede e \mathbf{n} é o operador posição da partícula. Para que possamos estudar o comportamento dinâmico dos dois elétrons sob efeito do campo, devemos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo. A inclusão do termo relativo ao campo elétrico altera a relação de recorrência

4.24 para

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + \left(\epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_2} + \mathcal{F}n_2 + U\delta_{n_1, n_2} \right) f_{n_1, n_2} \quad (4.40)$$

sendo $\mathcal{F} = eFa/J$. Este procedimento é facilmente realizado ao lembrarmos que

$$\sum_{n_1, n_2} eF\mathbf{a}\mathbf{n}|n_{1\uparrow}, n_{2,\downarrow}\rangle = (eF\mathbf{a}n_1 + eF\mathbf{a}n_2)|n_{1\uparrow}, n_{2,\downarrow}\rangle \quad (4.41)$$

Assim como no capítulo anterior, resolvemos as equações diferenciais 4.40 empregando um método numérico baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal

$$V(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!} \quad (4.42)$$

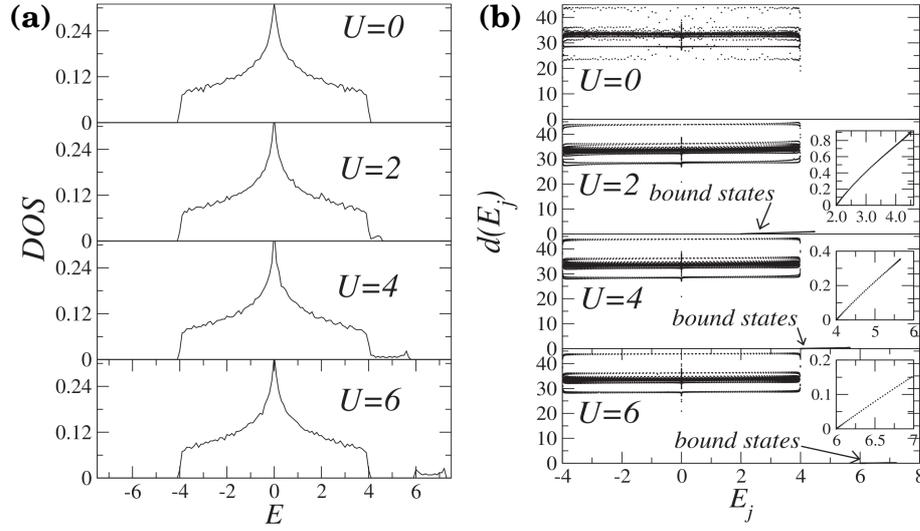
onde H é o hamiltoniano (ver apêndice A2). A função de onda num tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$, de maneira que usamos o método recursivamente para obter a função de onda no tempo t . Nos resultados que iremos apresentar usamos $\Delta t = 0,05$ e $n_0 = 20$. Os valores para a ordem de truncamento ($n_0 = 20$) 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, com precisão $|1 - |\Phi(t)|^2| < 10^{-9}$.

4.2 Cadeias cristalinas

Como dito anteriormente, o trabalho pioneiro de Shepelyansk que observou o enfraquecimento da localização de Anderson em um sistema de duas partículas interagentes em um meio desordenado [10], motivou uma série de estudos sobre sistemas de baixa densidade eletrônica (ver início da seção 4.1.1). Como exemplo destes estudos, especificando problemas de duas partículas, podemos citar: dois elétrons interagentes em anéis mesoscópicos desordenados 1D [123]; dois elétrons em cadeias desordenadas [169] e quasi-periódicas [170]; dois elétrons interagentes em cadeias aperiódicas tipo Fibonacci and Thue-Morse [130]; dois elétrons interagentes em cadeias aperiódicas [171]; (ver seção 2.3.5). Entretanto, como a física de sistemas puros é bem conhecida (modelo de Bloch), estudar a interação entre dois elétrons neste tipo de sistema revela aspectos inerentes apenas à interação.

Estudos sobre dois elétrons interagentes em cadeias puras foram realizados por Weisz e Claro [204]. Neste trabalho, através de resultados analíticos, eles apresentam a existência da banda de elétrons livres para dois elétrons e uma banda de estados ligados, bem como a largura destas bandas. A banda de estados ligados como sendo $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$, enquanto que a largura da banda de estados não ligados como $-4J \leq E \leq 4J$. Estes resultados foram corroborados por nossos estudos numéricos, como pode ser visto na figura 4.3 (ver referência [174]). A densidade de estados (figura 4.3a), definida como o número de níveis de energia dentro de um intervalo $E + dE$ ($DOS(E) = \sum_j \delta(E - E_j)$, E_j sendo os autovalores obtidos da diagonalização do Hamiltoniano), mostra a existência de uma sub-

Figura 4.3: (a) Densidade de estados e (b) Distância Média entre os elétrons, obtidos para uma cadeia com $N = 100$ sítios. Os auto-estados contidos na sub-banda apresentam pequenas distâncias, refletindo a natureza de estados ligados.)



Fonte: W.S. Dias, 2007 (referência [174]).

banda quando a interação entre os elétrons se faz existente. A distância média entre os dois elétrons (figura 4.3b), definida por $d(E_j) = \sum_{n_1, n_2} |n_2 - n_1| |f_{n_1, n_2}^j|^2$, reforçam existência de estados ligados contidos na sub-banda de energia com limites $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$.

Com o objetivo de entender um pouco mais a influência destes estados ligados sobre o comportamento dinâmico dos elétrons, nós revisitamos o problema e calculamos algumas grandezas que possam caracterizar melhor o sistema.

4.2.1 Resultados

Nossos cálculos, baseados na equação 4.40 e realizados mediante o emprego de um método numérico baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal (ver final da seção 4.1.2), nós consideramos por simplicidade $\hbar = J = e = a = 1$ e $\epsilon_n = 0$. Esta última consideração refere-se a tomar ϵ_n como referência de energia. Além disso, nós consideramos a função de onda como sendo um pacote gaussiano de largura σ

$$\langle n_1 \uparrow, n_2 \downarrow | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp \left[-\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2} \right] \exp \left[-\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2} \right] \quad (4.43)$$

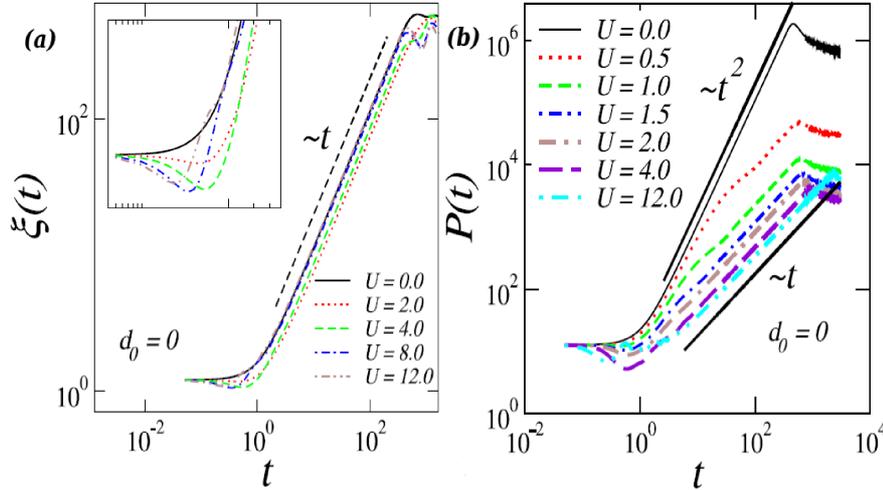
onde $A(\sigma)$ é a constante de normalização e σ é a largura do pacote de onda. Neste caso, os elétrons estão inicialmente dispostos nos sítios $\frac{N}{2} + d_0$ e $\frac{N}{2} - d_0$, ou seja, os elétrons estão dispostos inicialmente equidistantes do centro da cadeia.

Extensão espacial e participação

Com o objetivo de investigar o quanto a função de onda se estende pela cadeia, nós calculamos a extensão espacial $\xi(t)$, definida por

$$\xi(t) = \sum_{n_1, n_2} \sqrt{(n_1 - \langle n_1(t) \rangle)^2 + (n_2 - \langle n_2(t) \rangle)^2} |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad (4.44)$$

Figura 4.4: (a) Extensão espacial e (b) função participação versus tempo para uma cadeia de $N = 1500$ sítios, $U = 0, 2, 4, 6, 8, 12$, $\sigma = 1$ e $d_0 = 0$. Após um transiente inicial, vemos que ξ evolui balisticamente mesmo no regime de forte interação. A função participação apresenta um comportamento balístico para $U = 0$. Entretanto, na presença de interação, uma dependência temporal atípica ($P(t) \propto t$) é observada.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [167]).

onde

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} (n_i) |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad i = 1, 2 \quad (4.45)$$

Os cálculos foram realizados usando uma cadeia com $N = 1500$ sítios, alguns valores de interação ($U = 0, 2, 4, 6, 8, 12$) e ambos os elétrons ($\sigma = 1$) partindo do mesmo sítio ($d_0 = 0$). Esta última consideração visa investigar o papel da interação, visto que em nosso modelo a interação é *on-site*.

Na figura 4.4a nós apresentamos os resultados obtidos para a extensão espacial. Podemos ver que após um transiente inicial, ξ evolui linearmente com o tempo ($\xi \propto t$) mesmo quando a interação se faz presente. Em outras palavras, vemos que um alargamento balístico do pacote de onda de dois elétrons. No regime inicial, vemos que a presença de interação promove uma redução da extensão espacial. Esta redução na presença de interação está associada a existência de estados ligados no pacote de onda inicial.

Visto que a função participação nos fornece uma medida do grau de localização [58, 166], nós calculamos

$$P(t) = \frac{1}{\sum_{n_1, n_2} |f_{n_1, n_2}(t)|^4} \quad (4.46)$$

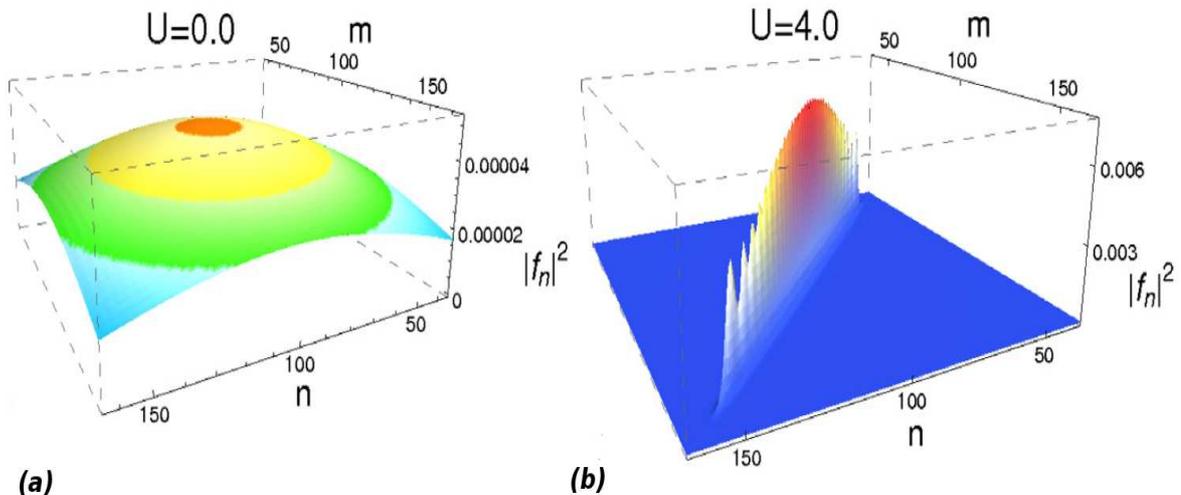
para o mesmo sistema anterior, cujos parâmetros foram $N = 1500$ sítios, alguns valores de interação ($U = 0, 2, 4, 6, 8, 12$) e ambos os elétrons ($\sigma = 1$) partindo do mesmo sítio ($d_0 = 0$). Na figura 4.4b nós podemos ver que na ausência de interação ($U = 0$), a função participação evolui proporcionalmente ao quadrado do tempo ($P(t) \propto t^2$). Isto indica que

os elétrons alargam-se uniformemente e independentemente sobre a cadeia, concordando com o comportamento temporal da função participação de 1 elétron em sistemas puros. Entretanto, na presença de interação, observa-se que a função participação evolui mais lentamente com o tempo ($P(t) \propto t$). Tendo em mente que esta função nos fornece uma medida da porção do espaço onde a amplitude da função de onda difere significativamente de zero, nós direcionamos a nossa atenção ao aspecto do pacote de onda eletrônico.

Aspecto do pacote de onda eletrônico

Tendo em vista o comportamento atípico da participação na presença de interação, nós investigamos o aspecto função de onda dos elétrons após um longo tempo (comportamento assintótico). Nós consideramos uma cadeia de $N = 200$ sítios, $\sigma = 1$, $d_0 = 0$ e $U = 0$ e 4. Podemos ver na figura 4.5 a função $|f_n(t)|^2 = \sum_m |f_{n,m}(t)|^2$ calculada para um tempo longo o suficiente para que a função de onda se alargue até as bordas da cadeia, versus o plano formado pelo espaço de Hilbert de cada elétron ($m \times n$). Na ausência de interação

Figura 4.5: Função de onda eletrônica após um longo tempo de evolução, em uma cadeia de $N = 200$ sítios, $\sigma = 1$, $d_0 = 0$ e (a) $U = 0$ e (b) $U = 4$. Na ausência de interação os elétrons alargam-se balisticamente pelo plano $n \times m$. Para $U > 0$, os estados ligados correlacionam o movimento do elétrons, de maneira que o pacote de onda se concentra ao longo da diagonal $n = m$.

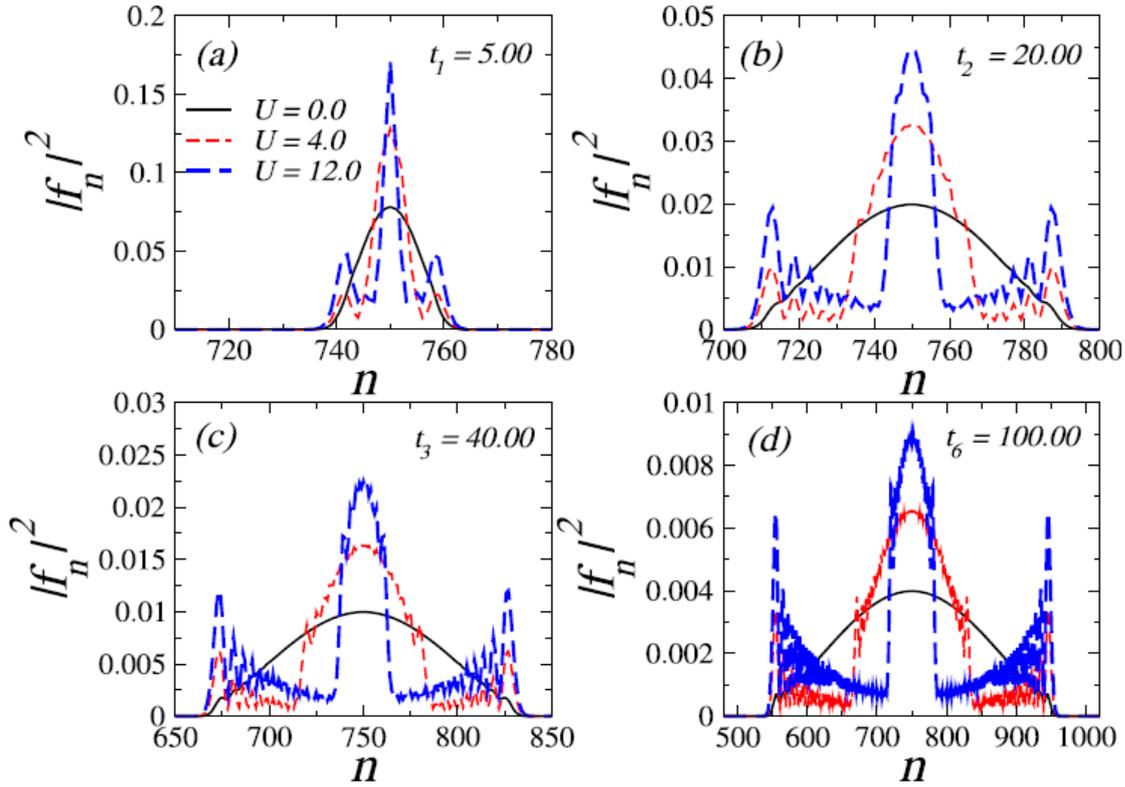


Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [167]).

(figura 4.5a), os elétrons propagam-se independentemente ou não correlacionados. Por se tratar de uma cadeia cristalina, observa-se que o alargamento do pacote de onda é balístico, estando os dois pacotes de onda distribuídos sobre o plano $n \times m$. Visto que os dois elétrons partiram do mesmo sítio, observa-se um máximo na região $n = m = \frac{N}{2}$. Na presença de interação (figura 4.5b), vemos que o pacote de onda fica concentrado em torno da posição $n = m$. Este comportamento está associado aos estados ligados contidos na banda de energia, responsáveis por correlacionar o movimento dos elétrons.

Devemos esperar que esta correlação eletrônica também deixe assinaturas na função de onda de um elétron. Em virtude disso, calculamos $|f_n(t)|^2 = \sum_m |f_{n,m}(t)|^2$ para deter-

Figura 4.6: Função de onda eletrônica após um longo tempo de evolução, em uma cadeia de $N = 1000$ sítios, $\sigma = 1$, $d_0 = 0$, $U = 0, 4, 10$ e (a) $t = 5$, (b) $t = 20$, (c) $t = 40$, (d) $t = 100$. Na ausência de interação os elétrons alargam-se balisticamente, apresentando uma estrutura de único pico. Para $U > 0$ temos duas estruturas principais, uma concentrada na posição inicial e outra apresentando uma frente de onda com alta amplitude.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [167]).

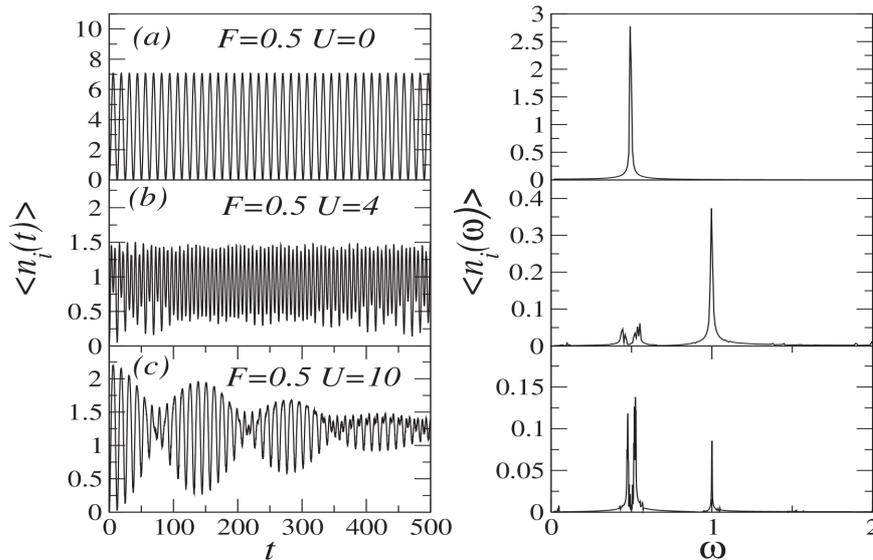
minados tempos durante o alargamento da função de onda eletrônica pela cadeia. Nestes cálculos, consideramos uma cadeia de $N = 1000$ sítios, $d_0 = 0$, interação coulombiana $U = 0, 4$ e 10 , $\sigma = 1$. Estes cálculos são apresentados na figura 4.6. Lembrando da função de onda inicial (expressão 4.43), gaussiana de largura unitária, observamos que a ausência de interação não modifica a estrutura do pacote de onda ao passar do tempo. O pacote de onda alarga-se balisticamente apresentando a estrutura de um único pico. Entretanto, na presença de interação, mesmo para tempos iniciais, vemos um transiente de uma estrutura gaussiana ($t = 0$) para um pacote de onda apresentando duas estruturas principais. Uma dessas estruturas apresenta uma forte concentração na posição inicial, enquanto que outra componente tem alta amplitude e apresenta uma aspecto tipo frente de onda. Ambas estruturas evoluem balisticamente. Esta estrutura dupla do pacote de onda, que para os tempos iniciais surge como um pequeno “encolhimento” do pacote de onda, reflete na extensão espacial do pacote, como foi apresentado na figura 4.4a. Além disso, a estrutura central do pacote de onda apresenta largura menor quanto maior for a interação elétron-elétron. A amplitude da frente de onda também é maior quanto maior for o valor da interação. Esta estrutura dupla do pacote de onda, possuindo regiões de amplitudes pequenas quando comparadas as amplitudes da estrutura central e da frente

de onda reflete na função participação, como apresentado na figura 4.4b. Para percebermos melhor, precisamos ter em mente que esta função nos fornece uma medida da porção do espaço onde a amplitude da função de onda difere significativamente de zero.

Influência do campo elétrico

Até o presente momento, todos os resultados apresentados referem-se a sistemas com campo elétrico não presente. A partir de agora, nosso objetivo é investigar os efeitos causados devido a presença do campo elétrico. Assim como apresentado na seção 4.1.2, a presença de um campo elétrico é capaz de aprisionar o elétron numa região restrita da rede. Nesta localização dinâmica o pacote de onda pode apresentar um comportamento oscilatório coerente, conhecido como oscilações de Bloch [176, 177, 178, 179, 180].

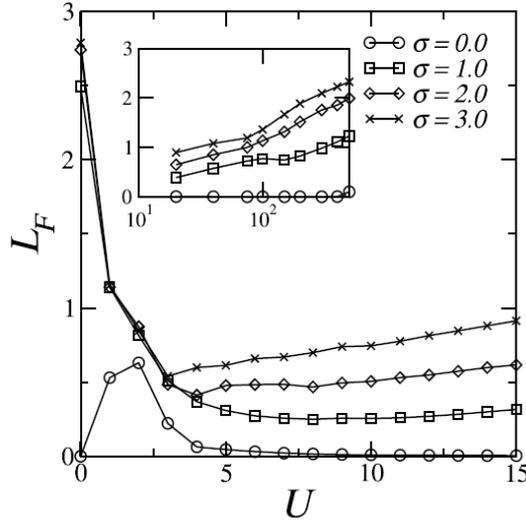
Figura 4.7: Quadro à esquerda: centroide $\langle n_i(t) \rangle$ calculado para uma cadeia de $N = 120$ sítios, pacotes de onda de largura $\sigma = 1$, $d_0 = 0$, campo elétrico constante $F = 0.5$ e diferentes graus de interação (a) $U = 0$, (b) $U = 4$ e $U = 10$. Quadros à esquerda (transformada de Fourier) $\langle n_i(\omega) \rangle$ mostram claramente que o centroide apresenta um comportamento oscilatório com frequência $\omega = F$ para $U = 0$, frequência predominante $\omega = 2F$ para $U = 4$ e frequência predominante $\omega = F$ para $U = 10$.



Fonte: W.S. Dias, 2007 (referência [174]).

Relatamos anteriormente alguns trabalhos envolvendo interação entre elétrons e campo elétrico [201, 202]. De maneira geral, podemos dizer que a interação elétron-elétron em sistemas de muitos corpos atua destrutivamente sobre as oscilações de Bloch. Para sistemas de duas partículas em uma cadeia sujeita a um campo elétrico externo, foi demonstrado que no limite de fraco hopping, a interação elétron-elétron induz uma oscilação adicional da velocidade de deriva dos elétrons. O período desta oscilação pode ser determinado unicamente pela alcance e intensidade da interação elétron-elétron [205]. Este modelo já foi estudado por nós anteriormente [174]. Neste trabalho foi demonstrado que o centroide do pacote de onda pode apresentar um comportamento oscilatório com uma frequência predominante de $\omega = 2F$ (ver figura 4.7), ou seja, o dobro da frequência das oscilações

Figura 4.8: Amplitude da oscilação de Bloch L_F versus a interação coulombiana U para pacotes de onda de diferentes larguras $\sigma = 0, 1, 2, 3$ e $F = 0.5$. Para pacotes de onda de largura finita a amplitude de oscilação diminui consideravelmente com o aumento de U para valores pequenos e volta a aumentar no regime de forte interação elétron-elétron.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [167]).

de Bloch (ver expressão 4.36). Este dobramento de frequência surge devido a existência de interação entre os elétrons e está associada aos estados ligados que promovem o movimento coerente dos elétrons. Assim, podemos pensar que os elétrons movendo-se coherentemente comportam-se como uma partícula de carga $2e$ (ver expressão 4.36). Um fato a ser observado é que na presença de interação elétron-elétron muito forte a frequência predominante passa a ser $\omega = F$, como pode ser visto na figura 4.7 [174].

Dentro deste cenário, nós revisitamos o modelo e investigamos o papel dos estados ligados sobre a amplitude da oscilação do pacote de onda, seja no modo $\omega = F$, quanto no modo de frequência dobrada $\omega = 2F$. Para isto, nós calculamos a posição média do elétron $\langle n(t) \rangle$, também conhecida como centroide, dado por

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} n_i |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad i = 1, 2 \quad (4.47)$$

Utilizando uma cadeia de $N = 120$ sítios, $F = 0.5$, $d_0 = 0$, diferentes valores de interação coulombiana e pacotes de onda de diferentes larguras $\sigma = 0, 1, 2, 3$, nós calculamos o centroide (equação 4.47) e reunimos os valores das amplitudes de oscilação L_F (ver figura 4.8). Apresentamos na figura 4.8 estes valores de amplitude de oscilação L_F versus a interação elétron-elétron U . Considerando o caso particular de $\sigma = 0$, ou seja, a função de onda do elétron é do tipo delta, vemos que não é observado oscilações de Bloch para $U = 0$. Quando a interação elétron-elétron está presente, a amplitude de oscilação apresenta um máximo para um valor de interação finita, com a amplitude de oscilação desaparecendo no regime de fortes interações. Entretanto, para pacotes de onda de largura finita $\sigma > 0$, observa-se um cenário diferente. Na ausência de interação $U = 0$, o centróide oscila com uma amplitude igual a amplitude de oscilação observada para sistemas de elétrons não

interagentes. Na presença de interação observa-se que a amplitude de oscilação inicialmente diminui a medida que U aumenta até um regime de interação intermediário $U \approx 4$. A medida que a interação U cresce ainda mais, indo para um regime de fortes interações, observa-se um lento aumento da amplitude de oscilação. Além disso, observa-se que o valor assintótico da amplitude aumenta com a largura inicial dos pacotes de onda.

Todos estes aspectos podem ser entendidos qualitativamente ao destacarmos que o pacote de onda inicial é composto por componentes formadas por estados ligados e não ligados. Como dito anteriormente, a banda de estados não ligados é centrada em $E = 0$, indo de $E = -4J$ a $E = 4J$. Já a banda de estados ligados tem uma largura de energia $U \leq E \leq \sqrt{16J^2 + U^2}$ [204]. Lembrando da seção 4.1.2, vemos que a amplitude de oscilação (expressão 4.38) é proporcional a largura da banda de energia e inversamente proporcional à carga efetiva. Dentro desta análise, vemos facilmente o motivo da largura de oscilação da componente não ligada ser maior que a largura de oscilação da componente ligada. Devemos ter em mente também o quanto estas componentes ligadas e não ligadas dependem da largura do pacote de onda inicial. Como a interação é *on-site*, quanto maior a largura do pacote de onda, maior a contribuição dos estados não ligados. Assim, um pacote de onda inicial Gaussiano tem uma densidade espectral de estados centrados em $E = 0$. Assim, a medida que a interação U cresce, aumenta-se a significância das componentes ligadas, levando a uma diminuição da amplitude de oscilação. Para valores de interação U muito forte, a grande distância da banda de estados ligados da distribuição espectral do pacote de onda faz com que haja pouca influência destas componentes não ligadas. Isto pode ser visto ao observar-se a reamplificação do modo de oscilação $\omega = F$.

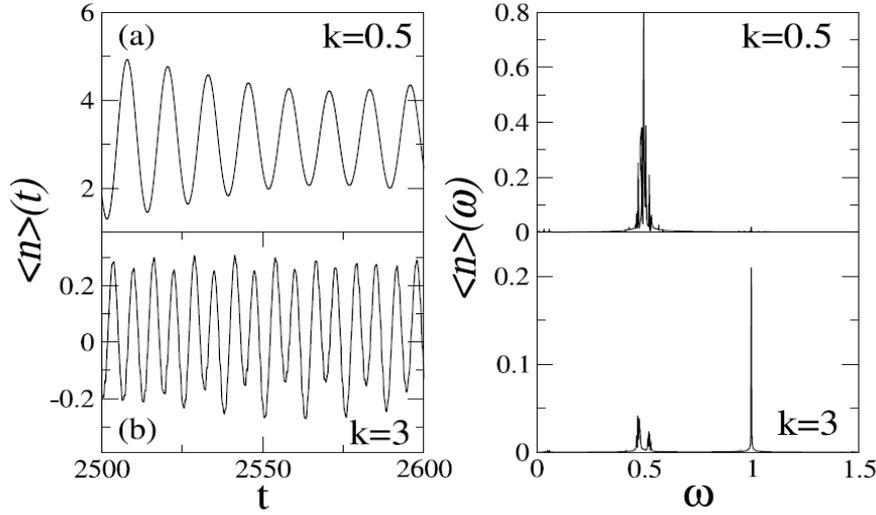
Para que possamos extrair maiores informações sobre a influência dos estados ligados sobre frequência das oscilações de Bloch, nós investigamos agora a evolução temporal de um pacote de onda Gaussiano com uma velocidade inicial, dada por

$$\langle n_1 \uparrow, n_2 \downarrow | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp[ik(n_1 + n_2)] \exp\left[-\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2}\right] \exp\left[-\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2}\right] \quad (4.48)$$

onde i é a unidade imaginária. O fator de fase $e^{ik(n_1+n_2)}$ governa a velocidade inicial do pacote de onda, neste caso particular, com velocidade idêntica para ambos os elétrons. Isto também pode ser usado para deslocar a densidade espectral do pacote de onda do centro da banda.

Dentro destas considerações, nós calculamos a dependência temporal da posição média $\langle n(t) \rangle$ numa cadeia de $N = 100$ sítios, para elétrons inicialmente na mesma posição $d_0 = 0$, $F = 0.5$, $U = 8$ e (a) $k = 0.5$ e (b) $k = 3.0$. Estes cálculos podem ser vistos na figura 4.9. Para pequenos valores de k , nós obtemos um modo de frequência único em $\omega = F$. Como a banda de estados ligados está distante do centro da banda na qual a densidade espectral do pacote de onda está ligeiramente deslocado, os estados não ligados governam a dinâmica dos elétrons. Entretanto, para $k = 3$ o cenário obtido é o contrário: obtemos um comportamento oscilatório cuja frequência predominante é $\omega = 2F$. Vemos que o dobramento da frequência de Bloch persiste mesmo para fortes valores de interação, diferente do observado na referência [174] (figura 4.7). A diferença presente neste caso está associado a densidade espectral do pacote de onda inicial que está bem deslocado do centro

Figura 4.9: Dados para a posição média $\langle n(t) \rangle$ versus tempo para uma cadeia com $N = 100$ sítios, $d_0 = 0$, $F = 0.5$, $U = 8$, $\sigma = 1$ e (a) $k = 0.5$ e (b) $k = 3$. Observa-se que um pequeno valor de k é capaz de reamplificar o modo com frequência $\omega = F$ para valores de interação forte.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [167]).

da banda ($k = 3$). Neste caso temos uma composição considerável de estados ligados, o que promove o movimento coerente dos elétrons e conseqüentemente o dobramento de frequência das oscilações de Bloch.

4.3 Cadeias com desordem correlacionada de longo alcance

Diferente do modelo tratado anteriormente, o modelo tratado nesta seção refere-se a dois elétrons numa cadeia desordenada. Como foi apresentado na seção 2.3.3, a presença de correlações na distribuição da desordem acrescenta ao modelo resultados não previstos pela teoria de escala. De maneira geral, observamos para elétrons não interagentes e ausência de campo elétrico que este modelo apresenta uma banda de estados estendidos para $\alpha > 2$ [104]. Para que possamos investigar a influência da interação elétron-elétron neste modelo, introduzimos a desordem na distribuição das energias ϵ_n da equação 4.40 através da relação

$$\epsilon_n = \zeta(\alpha, N) \sum_{k=1}^{N/2} \left(\frac{1}{k}\right)^{\alpha/2} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right) \quad (4.49)$$

onde ϕ_k são $N/2$ fases aleatórias independentes uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 2\pi]$ [104, 198]. Este último parâmetro representa a fonte de desordem da série. Mantemos esta sequência de maneira que $\langle \epsilon_n \rangle = 0$. $\zeta(\alpha, N)$ é uma constante de normalização usada para manter a variância (segundo momento em torno da média) da distribuição sendo unitária para todos os tamanhos de cadeia. O parâmetro α controla o grau de correlação da sequência.

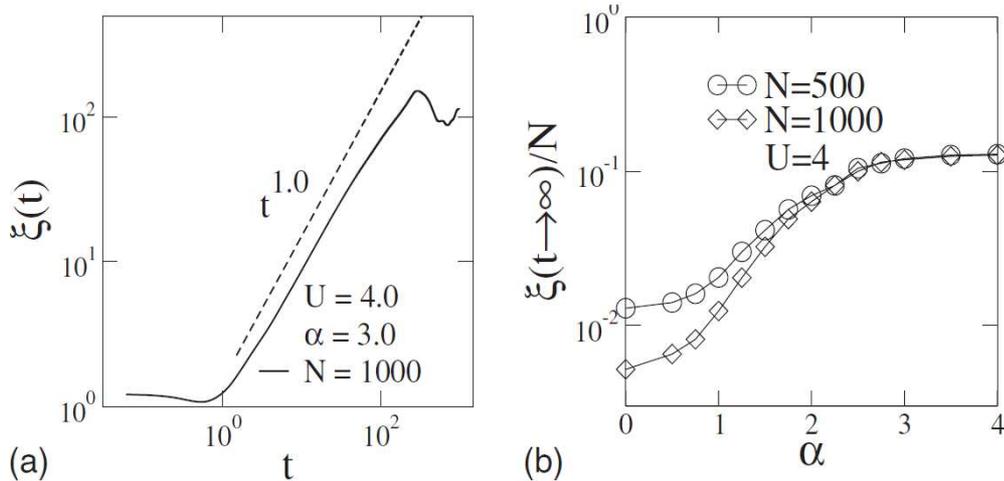
4.3.1 Resultados

Assim como o modelo anterior, nós empregamos o método numérico baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal (ver final da seção 4.1.2) sobre as equações 4.40, sendo ϵ_i governado pela equação 4.49. Por simplicidade, consideramos $\hbar = J = e = a = 1$. Além disso, nós consideramos a função de onda como sendo um pacote gaussiano de largura σ , definido na equação 4.43, da mesma forma que o modelo anterior. Consideramos os elétrons inicialmente dispostos nos sítios $\frac{N}{2} + d_0$ e $\frac{N}{2} - d_0$, ou seja, os elétrons estão dispostos inicialmente equidistantes do centro da cadeia. É importante destacar que, em função da variável aleatória ϕ_k presente na distribuição dos acoplamentos *exchange*, nós realizamos uma média configuracional sobre o desordem - 8000 realizações para o menor tamanho de cadeia e 500 realizações para o maior. Além disso, os valores para a ordem de truncamento ($n_0 = 20$) 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, com precisão $|1 - |\Phi(t)|^2| < 10^{-9}$.

Extensão espacial

A primeira quantidade calculada foi a evolução temporal da extensão espacial do pacote de onda dos dois elétrons, definida anteriormente (ver equação 4.44). Em nossos cálculos nós consideramos cadeias com $N = 500$ e $N = 1000$ sítios, elétrons partindo do mesmo sítio $d_0 = 0$, $\sigma = 1$, interação coulombiana $U = 4$ e diversos valores de α (parâmetro que controla o grau de correlação).

Figura 4.10: (a) Extensão espacial $\xi(t) \times$ tempo t para $\alpha = 3.0$, $N = 1000$ sítios e $U = 4.0$. (b) Extensão espacial assintótica $\xi(t \rightarrow \infty)/N \times$ parâmetro de correlação α para dois tamanhos de cadeia. O comportamento balístico em (a) e o platô unido com o colapso de dados em (b) são assinaturas claras de estados estendidos no limite de forte correlação ($\alpha > 2$).



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

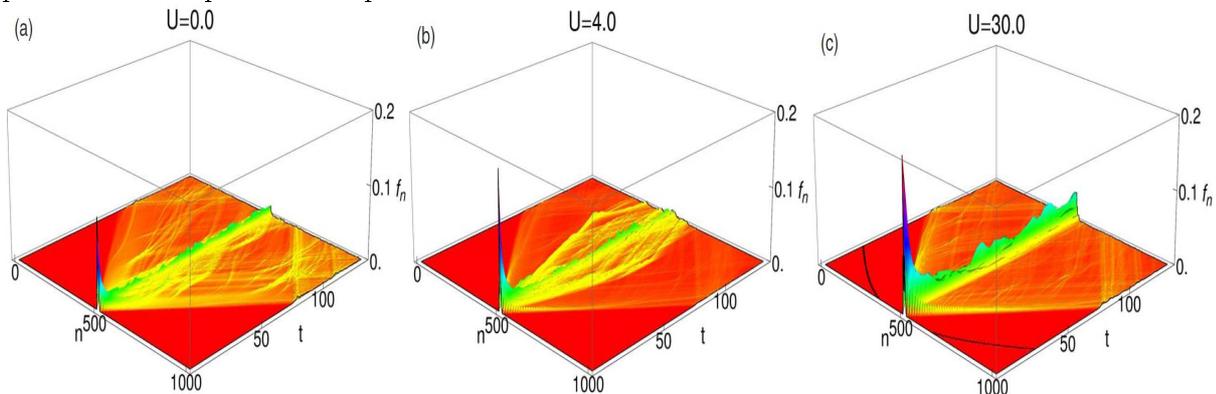
Visto que este sistema apresenta uma banda de estados estendidos para $\alpha > 2$ [104], podemos ver que neste regime a extensão espacial dos dois elétrons apresenta um alargamento balístico (ver figura 4.10).

O platô apresentado para tempos muito longos indica que o pacote de onda chegou às bordas da cadeia. Assim como o modelo não interagente, temos um indicativo de que os elétrons se comportam como um sistema cristalino no limite de fortes correlações. Para que esta suposição possa se tornar uma afirmativa, nós realizamos cálculos com cadeias com $N = 1000$ sítios e $N = 500$ sítios e parâmetros d_0 , σ e U iguais ao da figura 4.10a. Estes cálculos foram realizados para diversos graus de correlação ($\alpha = 0$ até $\alpha = 4.0$) e organizados na figura 4.10b. Observa-se que a extensão espacial assintótica reescalada $\xi(t \rightarrow \infty)/N$ versus o parâmetro de correlação α apresenta um colapso de dados para $\alpha > 2$. Tendo em mente que o pacote de onda em um sistema governado por estados estendidos alarga-se por toda a cadeia, é fácil perceber que a extensão espacial para tempos muito longos é proporcional a N . Desta forma, o colapso de dados da extensão espacial reescalada para dois tamanhos de cadeia indica que os pacotes de onda se alargaram por toda a cadeia. Em outras palavras, vemos que o sistema é governado por estados estendidos para $\alpha > 2$. Este resultado é corroborado pela dinâmica balística da extensão espacial apresentada na figura 4.10a. Por outro lado, vemos que a extensão espacial reescalada (figura 4.10b) depende do tamanho da cadeia para regimes de fraca correlação ($\alpha < 2$). Isto significa que o pacote de onda está localizado num segmento finito da cadeia, ou seja, o sistema é governado por estados localizados.

Probabilidade de Retorno e correlação entre elétrons

Diante dos resultados preliminares, vemos que a interação não afeta o ponto de transição metal-isolante do modelo eletrônico com desordem correlacionada de longo alcance [104]. Visto que o presente modelo no limite de fraca correlação ($\alpha < 2$) é governado por estados localizados e que o nosso modelo já foi amplamente estudado neste regime (ver referências [10, 57, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129]), nos concentramos nossa atenção no regime de fortes correlações ($\alpha > 2$).

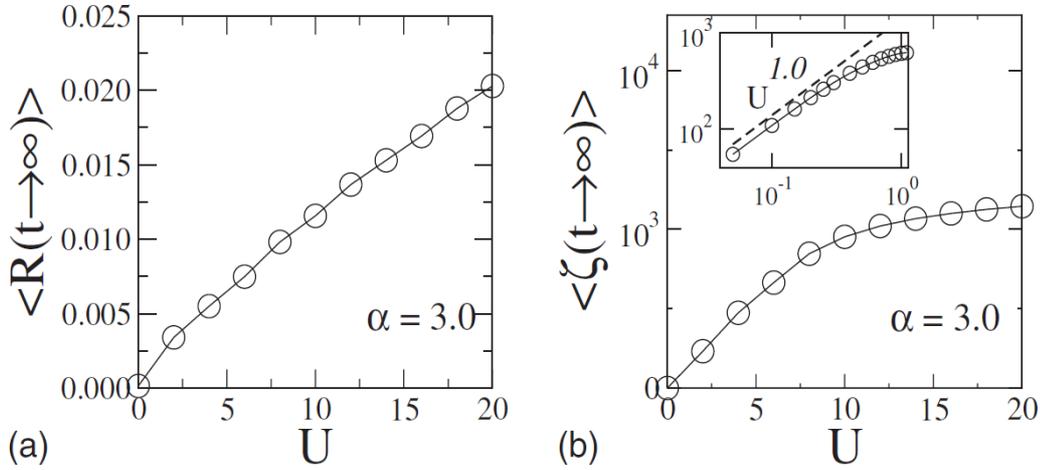
Figura 4.11: Evolução temporal do pacote de onda de um elétron, ou seja, $|f_{n_i}(t)|^2 = \sum_{n_j} |f_{n_i, n_j}(t)|^2$ versus t versus n . Foram utilizadas cadeias com $N = 1000$ sítios, $d_0 = 0$, $F = 0$, $\alpha = 3$ e (a) $U = 0$, (b) $U = 4$ e (c) $U = 30$. Para $U > 0$ vemos que uma fração finita do pacote de onda permanece aprisionado no sítio inicial.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

Na figura 4.11 nós apresentamos o aspecto do pacote de onda de um elétron $|f_{n_i}(t)|^2 = \sum_{n_j} |f_{n_i, n_j}(t)|^2$ calculada para cadeias com $N = 1000$ sítios, $\alpha = 3.0$, $d_0 = 0$, $\sigma = 1$,

Figura 4.12: Calculadas para um tempo muito longo tem-se a (a) probabilidade de retorno $R(t \rightarrow \infty)$ e (b) função correlação $\zeta(t \rightarrow \infty)$ versus interação elétron-elétron U . Vê-se que a interação entre os elétrons é responsável por correlacionar os elétrons e aprisionar uma porção finita do pacote de onda.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

$F = 0$ e interação elétron-elétron sendo (a) $U = 0$; (b) $U = 4$; (c) $U = 30$. Podemos ver claramente que uma fração finita do pacote de onda fica aprisionada na posição inicial quando a interação entre os elétrons se faz presente. Além disso, observa-se também que esta porção é maior quanto maior for o valor da interação elétron-elétron.

Este resultado fica mais evidente ao calcularmos a amplitude da função de onda no sítio inicial

$$R(t) \equiv |f_{n_1^0, n_2^0}(t)|^2, \quad (4.50)$$

conhecida como probabilidade de retorno. $R(t)$ informa-nos a probabilidade de encontrar o elétron na posição inicial. se em um tempo muito longo ($t \approx 10^6$) obtermos $R(t) \rightarrow 0$, temos uma função de onda não posicinada no sítio inicial. Ao contrário, se a probabilidade de retorno saturar num valor finito, teremos um pacote de onda localizado/aprisionado.

Na figura 4.12a nós reunimos os dados da probabilidade de retorno calculada para um tempo muito longo e considerando sistemas com diferentes valores de interação elétron-elétron U . Vemos que a probabilidade de retorno aumenta a medida que a interação aumenta, o que significa dizer que que uma parte dos pacotes de onda realmente fica mais aprisionado nos sítios iniciais a medida que a interação cresce. Através dos cálculos da função correlação

$$\zeta = \langle n_1 n_2 \rangle - \langle n_1 \rangle \langle n_2 \rangle \quad (4.51)$$

onde $\langle n_1 \rangle$ e $\langle n_2 \rangle$ são as posições médias (expressão 4.45) e

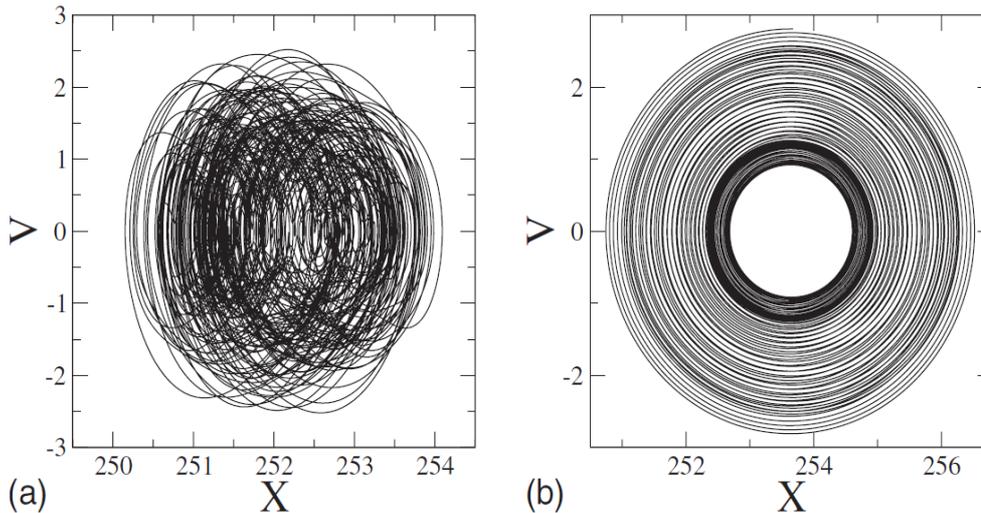
$$\langle n_1 n_2 \rangle = \sum_{n_1, n_2} n_1 \cdot n_2 |f_{n_1, n_2}|^2 \quad (4.52)$$

que exprime o quanto as posições dos elétrons estão correlacionadas, vemos que o aumento da probabilidade de retorno está associada ao aumento do movimento coerente dos elétrons. Este fato é visível na figura 4.12b, ao observarmos que ζ cresce com o aumento da interação U . Assim, vê-se que uma parte dos pacotes de onda realmente fica mais aprisionado nos sítios iniciais a medida que a interação cresce, associado também ao aumento da correlação entre os pacotes de onda. Em particular, a função correlação para tempos longos indica um crescimento linear no regime de fraco acoplamento (ver *inset* na figura 4.12b).

Influência do campo elétrico

Além da influência da desordem sobre a dinâmica dos pacotes de onda, existirá um novo ingrediente. Como já foi bem trabalhado neste capítulo, sabemos que o campo elétrico é capaz de produzir um aprisionamento dinâmico em elétrons. Este fenômeno, quando observado em sistemas puros ou apresentando fases estendidas, observa-se oscilações coerentes, conhecidas como oscilações de Bloch [198, 199, 200]. Dentro deste cenário, investigaremos a coexistência dos ingredientes campo elétrico, desordem e correlação.

Figura 4.13: Velocidade do centroide versus posição para uma cadeia de $N = 500$ sítios, $U = 0.0$, $F = 0.5$, $d_0 = 0$ e $\alpha = 0.0$ e $\alpha = 3.0$. Vemos oscilações coerentes para fortes correlações, indicando um regime de oscilações de Bloch.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

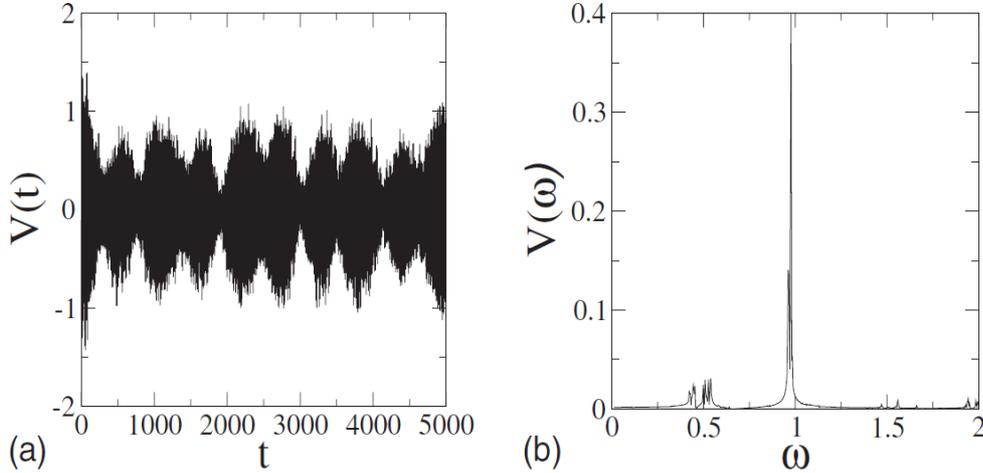
Com o objetivo de certificar o papel da desordem sob a dinâmica eletrônica sob influência do campo elétrico, nós calculamos a posição média do centróide dos elétrons

$$X(t) = \frac{1}{2}[\langle n_1 \rangle(t) + \langle n_2 \rangle(t)] \quad (4.53)$$

e a velocidade do “centro de massa” [205]

$$V(t) = -2\mathfrak{S} \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} [f_{n_1+1, n_2}^* + f_{n_1, n_2+1}^*] \quad (4.54)$$

Figura 4.14: (a) Evolução temporal da velocidade do centróide para uma cadeia de $N = 500$ sítios, $\alpha = 3.0$, $F = 0.5$, $d_0 = 0$ e $u = 4.0$. (b) Espectro de Fourier $V(\omega)$ da velocidade. O espectro de frequências da velocidade apresenta um pequeno modo de oscilação para elétrons não interagentes ($\omega = F$). Entretanto, como trata-se de uma interação coulombiana intermediária ($U = 4$), a frequência predominante corresponde a $\omega = 2F$.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

onde \mathfrak{S} é unitário imaginário. Podemos ver na figura 4.13 o espaço de fase $V(t) \times X(t)$ calculados para cadeias com $N = 500$ sítios, elétrons dispostos inicialmente no mesmo sítio ($d_0 = 0$), $\sigma = 1$, $U = 0.0$ e (a) $\alpha = 0.0$ e (b) $\alpha = 3.0$. Para ambos os casos, consideramos uma evolução temporal até $t = 1000$. Observamos que o sistema apresentando fracas correlações (figura 4.13a) apresenta um aprisionamento dinâmico, porém os pacotes de onda apresentam oscilações incoerentes. Já no limite de forte correlação na distribuição da desordem (figura 4.13b) o espaço de fase apresenta oscilações coerentes, com uma pequena variação na amplitude. Esta oscilação coerente é uma assinatura clara das oscilações de Bloch e está associada a uma frequência de oscilação bem definida. Estes resultados são corroborados pela referência [198].

Dentro do limite de fortes correlações ($\alpha = 3.0$), nós calculamos a evolução temporal da velocidade do centróide para uma cadeia com $N = 500$ sítios, $\sigma = 1$, $F = 0.5$ e interação entre elétrons $U = 4.0$. Estes cálculos são apresentados na figura 4.14, onde podemos ver que dependência temporal da velocidade (figura 4.14a) apresenta um comportamento oscilatório com amplitude variável no tempo. Sua transformada de Fourier (figura 4.14b) apresenta duas frequências bem definidas. Uma frequência com $\omega = F$ e outra com $\omega = 2F$. A frequência $\omega = F$ está associada a oscilação não correlacionada dos elétrons, onde os elétrons oscilam quase que independentes (ver expressão 4.36). O padrão de amplitude modulada visto na figura 4.14a está associada a pequena divisão do pico em $\omega = F$. Esta separação da frequência surge em virtude do caráter não ligado da interação elétron-elétron, inibindo a dupla ocupação dos elétrons e conseqüentemente o *hopping* totalmente independente dos elétrons. Assim como o caso cristalino [174], vemos na figura 4.14 que a interação favorece o *hopping* coerente dos elétrons, fazendo com que os mesmos comportem-se como um elétron de carga $2e$. Em outras palavras, temos o

fenômeno de dobramento de frequência, que está associado aos estados ligados dos elétrons (que correlaciona o movimento dos mesmos), também bem estabelecido em sistemas com correlações de longo alcance, no limite de fortes correlações.

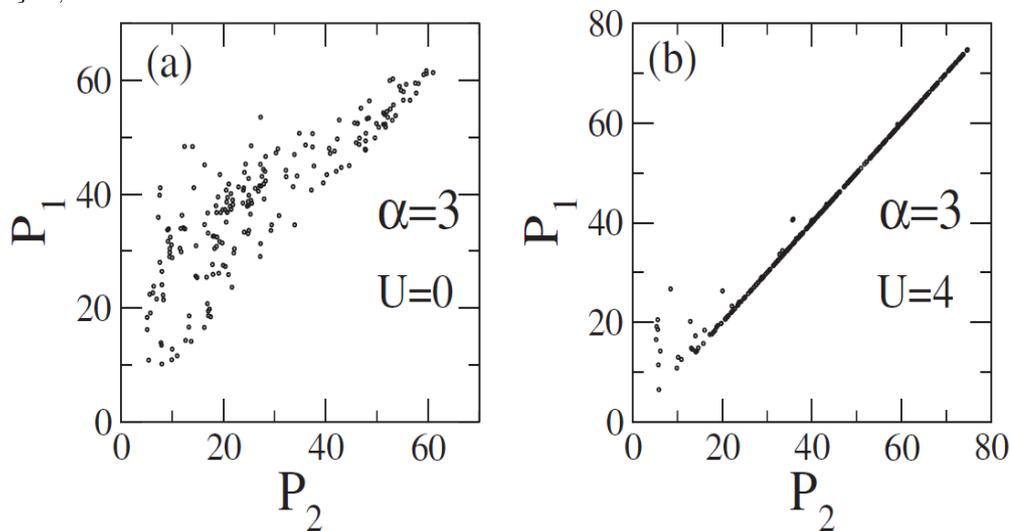
Natureza dos autoestados

Todos os resultados anteriores, relacionados a equação de Schrödinger dependente do tempo revelaram assinaturas de estados estendidos no modelo presente modelo (elétrons interagentes em cadeias com desordem correlacionada de longo alcance). Com o objetivo de caracterizar melhor a natureza dos estados eletrônicos do modelo em questão, nós aplicamos o procedimento de diagonalização direta (ver parte final da seção 4.1.1) do Hamiltoniano 4.1, na ausência de campo elétrico. Tendo em mente a escrita matricial do hamiltoniano 4.1, (desenvolvida na seção 4.1.1), após o procedimento de diagonalização direta [164] nós seguimos a definição usual da função participação $P(E) = 1 / \sum_{n_1, n_2} |f_{n_1, n_2}(E)|^4$ [58, 166] para definir a função participação de cada elétron

$$P_i(E) = \frac{1}{\sum_{n_i=1}^N |f_{n_i}(E)|^4} \quad (4.55)$$

onde $|f_{n_i}(E)|^2 = \sum_{n_j} |f_{n_i, n_j}(E)|^2$ é a densidade de probabilidade para um único elétron.

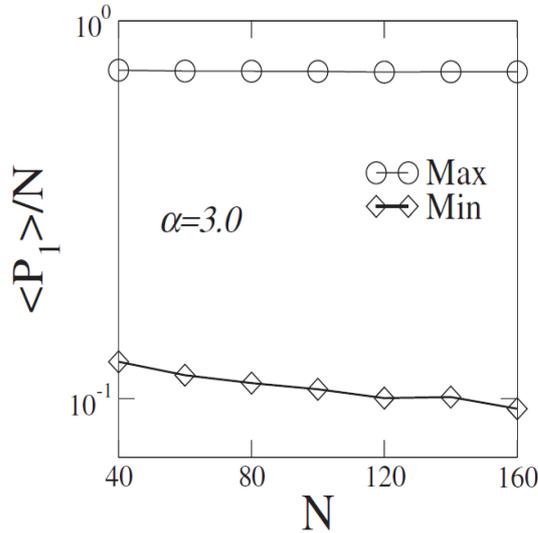
Figura 4.15: Função participação associada a cada elétron para todos os autoestados próximos ao centro da banda. (a) $u = 0$: os autoestados de dois elétrons em que os elétrons possuem valores de participação bem distintos. (b) $U = 4$: Os elétrons apresenta mesmos valores de participação, exceto os autoestados mais localizados.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

Como visto anteriormente, a função participação nos fornece uma medida da porção do espaço onde a amplitude da função de onda difere significativamente de zero. No presente caso, vemos o número de sítios no qual o elétron i propaga no autovetor de energia E . Os nossos cálculos foram realizados para cadeias com $N = 120$ sítios, $\alpha = 3$, na ausência de interação entre os elétrons ($U = 0$) e na presença de interação $U = 4$. Na figura 4.15 reunimos os dados para estados próximos ao centro da banda ($|E| < 0.5$) e

Figura 4.16: Participação mínima e máxima associada a cada elétron versus N calculadas para a janela de energia no centro da banda $|E| < 0.5$. Foram utilizadas cadeias com $N = 40, 60, 80, 100, 120, 140$ e 160 sítios, com parâmetro de correlação $\alpha = 3.0$ e interação elétron-elétron $U = 4$. Em virtude da desordem, foram calculados a média sobre 500 amostras. Nota-se que a participação máxima corresponde a estados estendidos ($P_{max} \propto N$), enquanto que a participação mínima corresponde a estados localizados ($P_{min} \rightarrow 0$ no limite termodinâmico).

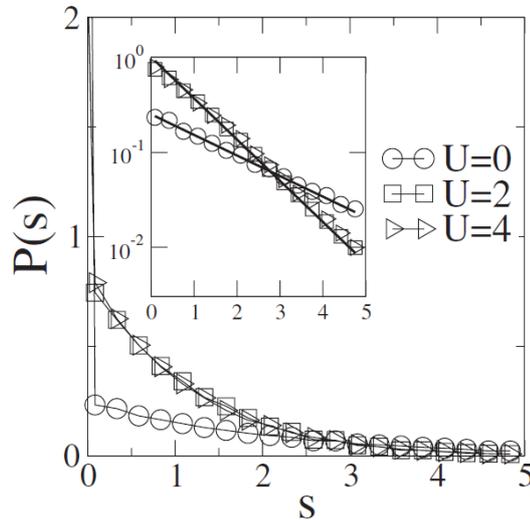


Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

organizamos a função participação de cada elétron de maneira que $P_1 > P_2$ para todos os estados. Para que fique mais claro, a participação do elétron no eixo vertical corresponde ao maior número de participação obtido dos dois elétrons. Destacamos o fato de que autoestados de um elétron podem coexistir dentro de uma mesma janela de energia. Isto pode ser visto claramente ao observarmos a figura 4.15a, onde temos um elétron estendido (participação elevada), enquanto que o outro elétron está localizado (participação baixa). Em outras palavras, vemos $P_1 \gg P_2$ para um dado autoestado. Isto pode ser entendido tendo em mente que os autoestados são degenerados e compostos pelo produto direto dos estados de um elétron, com $|\psi_{1,2}(E)\rangle = |\psi_1(E_1)\rangle|\psi_2(E_2)\rangle$, com $E = E_1 + E_2$. Vemos que na presença de interação $U = 4$ (ver figura 4.15b) esta degenerescência é quebrada e os estados estacionários não são mais escritos como um produto direto. Os elétrons tornam-se correlacionados, com ambos apresentando aproximadamente a mesma participação, exceto para o caso de estados mais localizados. Estes estados não são eficientemente correlacionados pela interação elétron-elétron.

Para melhor caracterizarmos estes estados, nós reunimos cálculos da participação mínima e máxima associada a cada elétron, calculadas para a janela de energia no centro da banda $|E| < 0.5$. Foram utilizadas cadeias com $N = 40, 60, 80, 100, 120, 140$ e 160 sítios, com parâmetro de correlação $\alpha = 3.0$ e interação elétron-elétron $U = 4$. Após uma média sobre 500 amostras nós reunimos os dados e plotamos na figura 4.16 a participação mínima (P_{min}) e máxima (P_{max}) reescalada (divida pelo tamanho da amostra) versus N . Vemos claramente que a participação máxima corresponde a estados estendidos, pois $P_{max} \propto N$ para todos os tamanhos de cadeia. Entretanto, pode-se notar também que estados com

Figura 4.17: Distribuições de espaçamento de níveis, calculadas para cadeias com $N = 120$ sítios, $\alpha = 3.0$ e diferentes valores de interação elétron-elétron $U = 0, 2$ e 4 . Observa-se que mesmo no regime de forte correlação o espaçamento de níveis apresentam uma forma tipo Poisson $P(s) \propto e^{-As}$. $P(s)$ possui uma singularidade tipo delta em $s = 0$ para $U = 0$, assinalando a degenerescência do espectro de energia. A interação elétron-elétron remove a degenerescência e $P(s)$ reassume uma forma Poissoniana independente do valor da interação U .



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [168]).

participação mínima estão associados a estados localizados, visto que $P_{min}/N \rightarrow 0$ no limite termodinâmico.

Os resultados anteriores sugerem a coexistência de estados localizados e estendidos dentro da mesma janela de energia para o sistema em questão. A distribuição do espaçamento de níveis de energia tem sido usado como critério de distinção entre estados localizados e estados estendidos [206, 207]. Em sistemas de um elétron, estados localizados são não correlacionados na energia e distribuídos segundo uma lei de Poisson $P(s) = e^{-s}$, onde s é o espaçamento medido em unidades de espaçamento médio. Estados estendidos apresentam uma distribuição de espaçamento de níveis seguindo uma distribuição de Wigner $P(s) \propto se^{-Cs}$ [208, 209]. A análise da transição de Anderson revela que uma nova distribuição, intermediária entre as distribuições de Wigner e de Poisson e invariante de escala, descreve as flutuações da densidade espectral [210].

Dentro deste cenário, motivados pela coexistência de estados localizados e estendidos dentro da mesma janela de energia, nós investigamos a estatística do espaçamento de níveis próximos ao centro da banda. Acreditamos que estes aspectos podem apresentar novos fatores quando comparado ao modelo de um único elétron, no qual estados estendidos e localizados usualmente não coexistem na mesma janela de energia. Em nossos cálculos utilizamos a janela de energia próximo ao centro da banda $-0.5 < E < 0.5$. Foram utilizadas cadeias com $N = 120$ sítios, $\alpha = 3.0$ e $U = 0.0, 2.0$ e 4.0 . Um processo de desdobramento espectral foi utilizado para manter o nível médio de afastamento igual a unidade em cada segmento da janela de energia [210].

Os resultados são apresentados na figura 4.17. Observamos que na ausência de intera-

ção, a distribuição do espaçamento de níveis apresenta uma singularidade tipo delta para $s = 0$. Isto está associado com a degenerescência da energia total $E = E_1 + E_2$, com E_i variando dentro da banda de energia de um elétron. Do número total de estados (N_0) incluído no intervalo de energia considerado, o número de estados degenerados será dado pelo número total de pares ($N_0^2/2$). Os demais estados devem seguir a usual distribuição de Poisson. Portanto, espera-se que o nível de afastamento assuma a forma combinada $P(s) = (1/2)\delta(s) + (1/4)e^{-s/2}$, onde s é medido em unidades do espaçamento médio dos níveis, incluindo níveis degenerados e não degenerados. A presença de estados estendidos não afeta a distribuição porque estados não degenerados que são vizinhos mais próximos em energia raramente são um par de estados estendidos, devido a seu nível de repulsão intrínseco. O *fitting* dos dados para $U = 0$ no inset da figura 4.17 corresponde ao termo exponencial da distribuição proposta. Para os elétrons interagentes, a degenerescência é quebrada e a singularidade tipo delta é removida. A distribuição de Poisson recupera sua forma usual, como mostrado pelo *fitting* dos dados para U finito no inset na figura 4.17. O pequeno desvio para pequenos valores de s é um efeito de tamanho finito. Além disso, devemos destacar a universalidade da distribuição do espaçamento de níveis no que diz respeito à força da interação U .

Interação elétron-fônon

Neste capítulo nós investigaremos a ação de outro tipo de interação sobre a dinâmica do pacote de onda eletrônico. Assumindo que os íons da rede possuem um pequeno movimento oscilatório em torno do ponto de equilíbrio, torna-se necessário levar em consideração a existência de modos vibracionais da rede, ou seja, a existência de fônons. A interação da função de onda eletrônica com esta rede que possui estes modos de vibração dá origem a um tipo de interação, conhecida usualmente como interação elétron-fônon. Esta interação, após exceder um valor crítico, promove uma localização do pacote de onda eletrônico conhecido como auto-armadilhamento (*self-trapping*) [21, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Dentro deste contexto, nossos estudos foram direcionados a dois modelos. No primeiro nós realizamos um estudo comparativo do fenômeno de *self-trapping* em redes 2D quadradas e hexagonais (*honeycomb*). Considerando sistemas cristalinos, nós mostramos a dependência do fenômeno com a topologia da rede. Mostramos que o parâmetro crítico da interação elétron-fônon que governa o *self-trapping* escala linearmente com a função participação inicial independente do tipo de rede. Além disso, mostramos que o número de coordenação da rede é um parâmetro topológico importante para a transição *self-trapping*. No segundo modelo nós investigamos a coexistência de interação elétron-elétron e interação elétron-fônon numa cadeia cristalina. Considerando um sistema de dois elétrons de spins opostos, nossos resultados mostram que a magnitude da interação elétron-fônon necessária para promover o *self-trapping* é menor quanto maior for o valor da interação elétron-elétron. O primeiro trabalho foi publicado na revista *Physical Review B*, referência [211] (ver anexo E), enquanto que o segundo trabalho foi aceito para publicação na revista *European Physics Journal B*.

5.1 Equação de Schrödinger não linear

Nos capítulos anteriores foram apresentados vários trabalhos relacionados ao transporte eletrônico. É evidente que o problema de um elétron em uma rede, a rigor, é um problema de muitos corpos. Nota-se também que o surgimento de novos ingredientes contidos nos modelos tem como objetivo a compreensão e aprimoramento do conhecimento sobre o comportamento de elétrons e excitações magnéticas em diversos sistemas. O ingrediente mais abordado até o presente momento, sendo o foco principal desta tese, foi a interação eletrônica. Foram relatados vários trabalhos sobre o papel da interação

elétron-elétron sobre os estados eletrônicos do sistema, contextualizando a abordagem de sistemas de baixa densidade de partículas. Entretanto, assim como a interação entre elétrons, outro tipo de interação também tem um importante papel na dinâmica eletrônica: a interação elétron-fônon. Esta interação surge da interação da função de onda eletrônica com a rede que possui modos de vibração (fônons) decorrente de pequenos movimentos oscilatórios em torno do ponto de equilíbrio. Assim, a interação elétron-fônon dá origem a um termo não-linear na equação de Schrödinger.

Os primeiros estudos direcionados à equação de Schrödinger não linear (ESNL¹) foram realizados por Holstein [19, 20]. Em seu modelo está contido uma excitação movendo em um cristal unidimensional interagindo com as vibrações da rede, descritas como osciladores harmônicos. Dado um meio cristalino com N sítios, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{j=1}^N \hat{P}_j^2 + \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N \hat{X}_j^2 + J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + \sum_{j=1}^N \epsilon_n c_j^\dagger c_j + A \sum_{j=1}^N \hat{X}_j c_j^\dagger c_j \quad (5.1)$$

onde \hat{X}_j é o operador posição relacionado ao grau de liberdade vibracional x_j do j -ésimo sítio, $\hat{P}_j \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$ é operador momentum associado este grau vibracional x_j do j -ésimo sítio. J é o termo de *hopping* de primeiros vizinhos e ϵ_n é a energia local do sítio n , que por simplicidade, em se tratando de uma rede cristalina, pode ser tomada como $\epsilon_n = 0$ sem qualquer perda de generalidade. A é um parâmetro de energia associado a energia eletrônica nos sítios da rede. Podemos dizer que A representa o termo de acoplamento do pacote de onda com as vibrações da rede.

Para resolvermos este hamiltoniano, assumimos que um dado estado do sistema pode ser representado como uma superposição das funções de onda de cada sítio (ϕ_j), de maneira que

$$\psi(\mathbf{r}, x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^N a_j(x_1, \dots, x_N) \phi_j(\mathbf{r} - j\mathbf{a}, x_j) \quad (5.2)$$

Cada função de onda $\phi_j(\mathbf{r} - j\mathbf{a}, x_j)$ está localizada sobre o j -ésimo sítio da rede e depende do valor da coordenada x_j (sendo \mathbf{a} o vetor da rede de Bravais). Os coeficientes $a_j(x_1, \dots, x_N)$ das funções de onda são, cada um, dependentes de todas as coordenadas internucleares e significa a amplitude de probabilidade de ocupação do elétron no j -ésimo sítio da rede.

Por se tratar de um problema em que a função de onda eletrônica interage com esta rede que possui estes modos de vibração, pensar sobre o tempo de resposta desta interação torna-se um fator importante. Assumindo que as vibrações moleculares nos sítios da rede (descritas por x_j) alcançam o equilíbrio vibracional numa escala de tempo muito inferior à escala da evolução do elétron, tem-se a então conhecida aproximação adiabática [22]. Entretanto, se esta interação não for instantânea, tem-se uma interação elétron-fônon não adiabática [22, 23, 212, 213]. Tem sido demonstrado que a presença do processo de relaxação da interação elétron-fônon é levado em conta em um sistema de dois níveis, existe um regime de *self-trapping* e uma coexistência de transições estáticas e dinâmicas,

¹Em inglês, esta sigla é dada por DNLSE em função do significado: *Discrete nonlinear Schrödinger equation*.

dependendo do grau de interação elétron-fônon e do tempo de relaxação [22]. Um atraso temporal de natureza não linear no termo de acoplamento elétron-fônon induz a uma redução do *self-trapping* para atrasos muito grandes. Entretanto, para tempos de resposta pequenos, porém finitos, a não linearidade necessária para promover o *self-trapping* é menor que no caso adiabático [212].

Tendo em vista o sucesso do modelo aproximado adiabática, sendo capaz de resgatar fatores essenciais da dinâmica do elétron-fônon [24, 25, 26, 27, 28, 29], direcionamos nossa atenção à tal modelo. Neste caso, significa que podemos ignorar a energia cinética da rede e minimizar as energias potenciais vibracional e eletrônica [19], de maneira que determinamos $H\psi$ como

$$\begin{aligned} H\psi &= \left[\frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N \hat{X}_j^2 + J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + \sum_{j=1}^N \epsilon_n c_j^\dagger c_j + A \sum_{j=1}^N \hat{X}_j c_j^\dagger c_j \right] \sum_i a_i \phi_i \\ &= \sum_i \left[\sum_j \left(\frac{M\omega^2}{2} x_j^2 \right) a_i + J(a_{i+1} + a_{i-1}) + Ax_i a_i \right] \phi_i \end{aligned} \quad (5.3)$$

Tomando o complexo conjugado $\psi^* = \sum_i a_i^* \phi_i^*$ (expressão 5.2), temos

$$\begin{aligned} \int \psi^* H\psi d\mathbf{r} &= \sum_j \frac{M\omega^2}{2} x_j^2 \left(\sum_{im} a_m^* a_i \int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} \right) + J \left(a_m^* (a_{i+1} + a_{i-1}) \int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} \right) \\ &+ A \left(x_i a_m^* a_i \int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} \right) \end{aligned} \quad (5.4)$$

Assumindo nulas as integrais de overlap ($\int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} = 0$ se $m \neq i$) e considerando normalizadas as funções de onda moleculares e as funções de onda de estado

$$\int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} = 1 \quad \text{se } i = j \quad (5.5)$$

$$\int \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1 \quad \rightarrow \quad \sum_i |a_i|^2 = 1 \quad (5.6)$$

podemos simplificar a expressão 5.4 (valor médio de H) como

$$H' = \sum_j \frac{M\omega^2}{2} x_j^2 + \sum_i [Ja_i^* (a_{i+1} + a_{i-1}) + Ax_i |a_i|^2] \quad (5.7)$$

Devemos calcular os x_j que minimizem a energia H' . Assim, diferenciando H' em relação a uma variável x_p , tendo em mente a condição de normalização (expressão 5.6), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'}{\partial x_p} &= M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 + \sum_i \frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} [Ax_i a_i + J(a_{i+1} + a_{i-1}) - \lambda a_i] \\ &+ \sum_i \frac{\partial a_i}{\partial x_p} [Ax_i a_i^* + J(a_{i+1}^* + a_{i-1}^*) - \lambda a_i^*] \end{aligned} \quad (5.8)$$

através de um multiplicador de Lagrange. Assim, utilizando a equação de Schrödinger

independente do tempo ($H\psi = E\psi$), vemos que

$$Ea_i^{(*)} = \sum_j \left(\frac{M\omega^2}{2} x_j^2 \right) a_i^{(*)} + J(a_{i+1}^{(*)} + a_{i-1}^{(*)}) + Ax_i a_i^{(*)} \quad (5.9)$$

$$\left(E - \sum_j \frac{M\omega^2}{2} x_j^2 \right) a_i^{(*)} = J(a_{i+1}^{(*)} + a_{i-1}^{(*)}) + Ax_i a_i^{(*)} \quad (5.10)$$

Através das equações 5.10 e 5.8 obtemos

$$\frac{\partial H'}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 + \left(E - \sum_j \frac{M\omega^2}{2} x_j^2 - \lambda \right) \sum_i \left(\frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} a_i + a_i^* \frac{\partial a_i}{\partial x_p} \right) \quad (5.11)$$

Em função da condição de normalização (expressão 5.6), o último termo desta expressão é nulo, o que nos dá

$$\frac{\partial H'}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 \quad (5.12)$$

Como a minimização da energia H' impõe que os valores x_p devem ser tais que as derivadas $\partial H'/\partial x_p$ sejam nulas, obtemos

$$x_p = -\frac{A|a_p|^2}{M\omega^2} \quad (5.13)$$

Desta forma, substituindo esta última expressão em 5.7 obtem-se a expressão final para o Hamiltoniano

$$H' = \sum_j \left[-\frac{A|a_p|^2}{M\omega^2} |a_j|^4 + J a_j^* (a_{j+1} + a_{j-1}) \right] \quad (5.14)$$

Por fim, utilizando as relações canônicas

$$i\hbar \dot{a} = \frac{\partial H'}{\partial a_j^*} \quad \text{e} \quad i\hbar \dot{a}^* = -\frac{\partial H'}{\partial a_j} \quad (5.15)$$

chegamos a equação não linear de Schrödinger

$$i\hbar \dot{a}_j(t) = J[a_{j+1}(t) + a_{j-1}(t)] - \chi |a_j(t)|^2 a_j(t) \quad (5.16)$$

onde $\chi = \frac{A^2}{M\omega^2}$ é o parâmetro que nos fornece o grau de interação elétron-fônon. Em termos matemáticos, temos que χ modula a não-linearidade da função acima.

Os aspectos dinâmicos da equação 5.16 podem ser investigados através de algoritmo de Runge-Kutta [163], obtendo assim as amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado. Através de quantidades físicas como a função participação [58, 166] e a probabilidade de retorno (ver seção 4.3.1), que oferecem medidas do grau de aprisionamento ou extensividade do pacote de onda, pode-se caracterizar a natureza estendida ou aprisionada (*self-trapping*) do sistema em função do grau de interação elétron-fônon.

Embora tenhamos apresentado a equação 5.16 no contexto de interação elétron-fônon (sistema eletrônico), equações deste tipo (ESNL) tem sido aplicadas também em estudos de condensados de Bose-Einstein [214, 215], redes ópticas [216, 217] e guias de onda acopladas [218, 219]. Outros aspectos bastante explorados também é a coexistência de não linearidade e desordem [68, 74, 220, 221, 222] e a existência de soluções tempo-periódicas exponencialmente localizadas no espaço (“breathers”) [215, 223, 224, 225, 226, 227, 228].

Seguindo a linha de investigação da influência de interações sobre o comportamento de elétrons e excitações magnéticas, mostraremos a seguir os dois modelos estudados envolvendo a interação elétron-fônon. O primeiro modelo, apresentado na seção seguinte, destina-se ao estudo da não linearidade oriunda da interação elétron-fônon sobre a dinâmica do pacote de onda em sistemas 2D. O segundo modelo destina-se ao estudo de dois elétrons interagentes via interação coulombiana em uma cadeia cristalina com não linearidade, também originada da interação elétron-fônon.

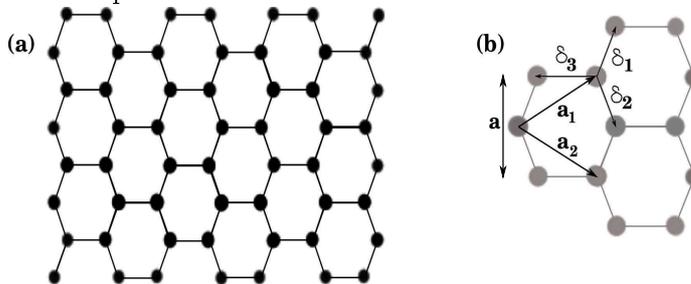
5.2 Interação elétron-fônon em redes quadradas e hexagonais

Todos os trabalhos apresentados neste capítulo, até o presente momento, apresentam a influência da interação elétron-fônon sobre as propriedades de transporte. Dentro dos estudos mais recentes, relatamos as investigações experimentais da interação elétron-fônon utilizando espectro de fotoemissão em filmes de pentaceno [229] e estruturas de grafeno [230, 231]. O grafeno é uma estrutura planar de átomos de carbono organizados em uma estrutura cristalina hexagonal (*honeycomb*), como está representado na figura 5.1a. Os vetores da rede (ver figura 5.1b) podem ser escritos como

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (5.17)$$

onde $a \approx 1,42 \text{ \AA}$ é conhecida como a distância carbono-carbono. Os três primeiros

Figura 5.1: (a) Representação da estrutura cristalina do grafeno. (b) Estrutura do grafeno construída a partir de duas redes triangulares interpenetradas, sendo \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 os vetores da rede e δ_i , $i = 1, 2, 3$ os vetores de primeiros vizinhos.



Fonte: Autor, 2011.

vizinhos no espaço real são dados por

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \delta_3 = -a(1, 0) \quad (5.18)$$

O grafeno pode ser visto como uma “fatia” individual e plana de uma estrutura 3D de grafite [232].

Do ponto de vista histórico, este sistema foi primeiramente investigado através de modelos *tight-binding* por Wallace [233] e McClure [234]. Durante muito tempo a estrutura do grafeno serviu como modelo acadêmico de baixa dimensionalidade para estudos de transporte eletrônico. Entretanto, a descoberta de nanotubos de carbono [235] motivou grande interesse na área. Dentre os inúmeros resultados relacionados a estruturas de carbono, destaca-se a observação experimental do grafeno [232]. Além da estabilidade em condições ambientes, “violando” o teorema de Mermim-Wagner² [236], as propriedades eletrônicas incomuns deste material, como alta mobilidade de portadores de carga e auto grau de pureza [237], tem despertado direcionamento à nanoeletrônica e nanocircuitos baseados em grafeno [237, 238, 239, 240].

Direcionando para o contexto de interação elétron-fônon, descrições baseadas nas equações de Dirac para estruturas de grafeno tem sido apresentadas [237]. Dentro do contexto de não linearidade cúbica na equação de Schrödinger, a influência deste termo oriundo da aproximação adiabática do acoplamento elétron-fônon foi investigada em redes bidimensionais, similares a estruturas de grafeno. O trabalho tem como objetivo descrever a influência de interações de primeiros vizinhos e também de longo-alcance [241].

Tendo em mente a grande utilização de estruturas cristalinas 2d quadradas em sistemas de transporte eletrônico e motivados pelas características particulares do grafeno [237], principalmente no que diz respeito a seu arranjo atômico, nós direcionamos nossa atenção ao estudo comparativo do fenômeno de self-trapping em redes quadradas e redes *honeycomb*.

5.2.1 Análise da rede hexagonal a partir da rede quadrada

Tendo em mente a equação de Schrödinger não linear (equação 5.16) apresentada na seção anterior (ver seção 5.1), para que possamos descrever o comportamento dinâmico do pacote de onda eletrônico numa rede com interação elétron-fônon adiabática, nós utilizamos a equação de Schrödinger

$$i\hbar \dot{a}_{n,m}(t) = J \sum_{\langle n',m' \rangle} a_{n',m'}(t) - \chi |a_{n,m}(t)|^2 a_{n,m}(t) \quad (5.19)$$

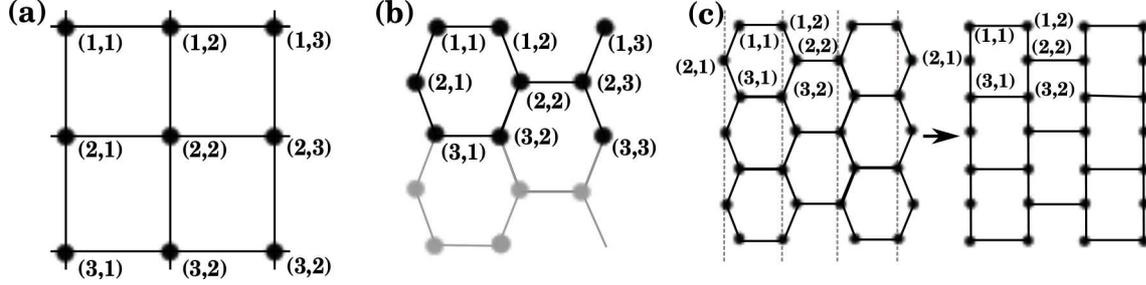
onde $a_{n,m}$ é a amplitude do pacote de onda no sítio (n, m) , J é o termo de *hopping* entre os sítios primeiros vizinhos $\langle n', m' \rangle$ e χ é o parâmetro não linear que controla a interação elétron-fônon. Por se tratar de uma rede cristalina, da mesma maneira que fizemos na dedução da equação 5.16, também consideramos os potenciais on-site $\epsilon_{n,m} = 0$, sem qualquer perda de generalidade. Este parâmetro pode ser tomado como uma referência de energia. Além disso, usamos $\hbar = J = 1$ e hopping de primeiros vizinhos.

A análise da organização atômica da rede quadrada é bastante comum e de fácil visualização. Obviamente as posições dos sítios seguem uma organização quadrada e, por

²O teorema de Mermim-Wagner demonstra a impossibilidade de uma rede cristalina em duas dimensões [236]. Seus argumentos são baseados no papel dos defeitos sobre a estabilidade termodinâmica e o papel de fônons de grandes comprimentos de onda, cujo número diverge para baixas temperaturas, fazendo com que as amplitudes dos deslocamentos interatômicos também apresentem uma divergência.

exemplo, tendo uma rede de $N = 3$ sítios (3×3) (ver figura 5.2a), considerando apenas

Figura 5.2: (a) Rede quadrada 3×3 . (b) Rede *honeycomb* 3×3 (c) “Mapeamento” da rede *honeycomb* numa rede quadrada. Pode-se pensar num “achatamento” da rede *honeycomb*, permitindo assim a melhor visualização dos termos de hopping de primeiros vizinhos.



Fonte: Autor, 2011.

o *hopping* entre primeiros vizinhos, é fácil ver que a “matriz de hopping” é dada por

$$M_{quadrada} = \begin{array}{c|ccccccccc} & |\phi_{1,1}\rangle & |\phi_{1,2}\rangle & |\phi_{1,3}\rangle & |\phi_{2,1}\rangle & |\phi_{2,2}\rangle & |\phi_{2,3}\rangle & |\phi_{3,1}\rangle & |\phi_{3,2}\rangle & |\phi_{3,3}\rangle \\ \langle\phi_{1,1}| & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,2}| & J & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,3}| & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,1}| & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,2}| & 0 & J & 0 & J & 0 & J & 0 & J & 0 \\ \langle\phi_{2,3}| & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J \\ \langle\phi_{3,1}| & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 \\ \langle\phi_{3,2}| & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 & J \\ \langle\phi_{3,3}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 \end{array} \quad (5.20)$$

A estrutura da rede *honeycomb* já não é tão simples assim para se construir. As posições dos sítios são definidas através das expressões 5.17 e 5.18. Tomando como exemplo uma rede 3×3 (ver figura 5.2b), considerando apenas o *hopping* entre primeiros vizinhos, é fácil ver que a “matriz de hopping” é dada por

$$M_{honeycomb} = \begin{array}{c|ccccccccc} & |\phi_{1,1}\rangle & |\phi_{1,2}\rangle & |\phi_{1,3}\rangle & |\phi_{2,1}\rangle & |\phi_{2,2}\rangle & |\phi_{2,3}\rangle & |\phi_{3,1}\rangle & |\phi_{3,2}\rangle & |\phi_{3,3}\rangle \\ \langle\phi_{1,1}| & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,2}| & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{1,3}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,1}| & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 \\ \langle\phi_{2,2}| & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 \\ \langle\phi_{2,3}| & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J \\ \langle\phi_{3,1}| & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 \\ \langle\phi_{3,2}| & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 \\ \langle\phi_{3,3}| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \end{array} \quad (5.21)$$

A figura 5.2c demonstra graficamente o processo de “mapeamento” da rede hexagonal (*honeycomb*) na rede quadrada. Pode-se pensar num “achatamento” da rede, até que a

organização atômica fique parecida com a organização da rede quadrada. Ao compararmos estas duas estruturas, vemos que todos os sítios da rede *honeycomb* tem apenas três primeiros vizinhos, diferentemente da rede quadrada que possui quatro primeiros vizinhos.

De maneira a analisarmos a propagação do pacote de onda, nós seguimos a evolução temporal de uma pacote de onda Gaussiano de largura σ

$$a_{n,m}(0) = \frac{1}{A(\sigma)} \exp \left[-\frac{(n - n_0)^2}{(4\sigma)^2} \right] \times \exp \left[-\frac{(m - m_0)^2}{(4\sigma)^2} \right] \quad (5.22)$$

localizado no sítio (n_0, m_0) . Procuramos sempre fazer com que (n_0, m_0) seja na região central da rede. Além disso, o método utilizado para integração da equação 5.19 foi o Runge-Kutta [163], obtendo assim as amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado. Acompanhamos a norma da função de onda todo o intervalo de tempo requisitado tendo como critério de precisão a conservação da mesma.

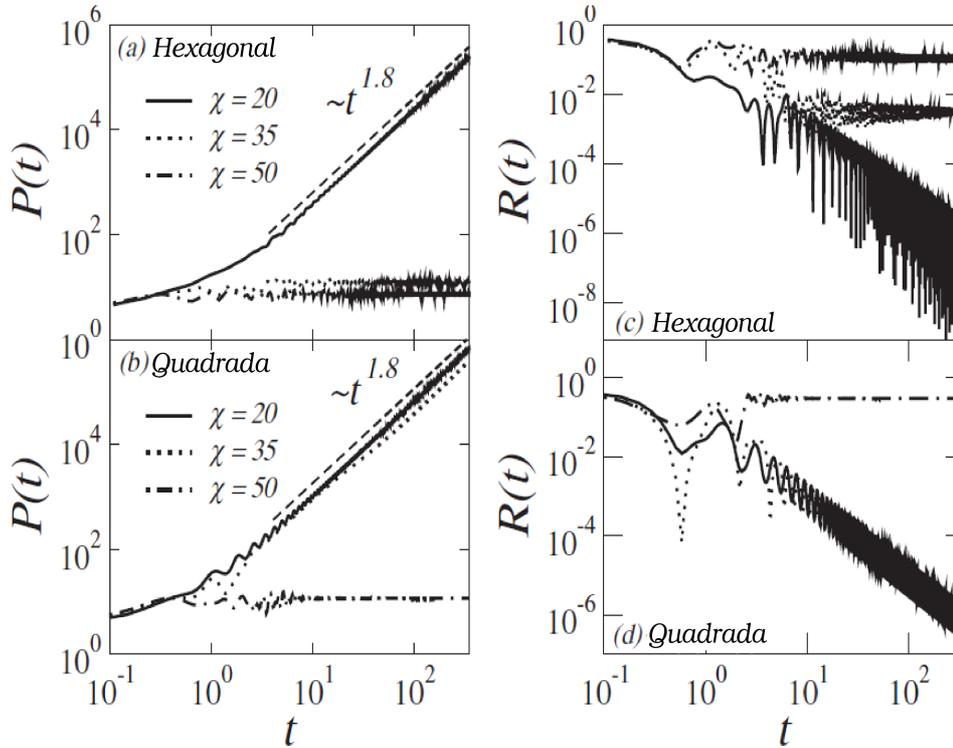
As medidas do grau extensividade do pacote de onda foram tomadas por meio da função participação [58, 166] ($P(t) = 1/\sum_{n,m} |a_{n,m}(t)|^4$) e a probabilidade de retorno ($R(t) = |a_{n_0,m_0}(t)|^2$), funções já apresentadas e utilizadas nos capítulos anteriores. Visto que $R(t)$ informa-nos a probabilidade de encontrar o elétron na posição inicial, se em um tempo muito longo ($t \approx 10^6$) obtermos $R(t) \rightarrow 0$, temos uma função de onda não posicinada no sítio inicial. Ao contrário, se a probabilidade de retorno saturar num valor finito, teremos um pacote de onda localizado/aprisionado. Da mesma forma, uma vez que a função participação nos dá uma estimativa do número de sítios sobre o qual o pacote de onda visitou até o tempo t , $P(t) \propto N^0$ em um tempo muito longo temos indica que o pacote de onda permanece localizado. Por outro lado, $P(t) \propto N^2$ corresponde a um regime em que o pacote de onda se estende por toda a rede.

5.2.2 Resultados

Como o nosso objetivo é apresentar um estudo comparativo do fenômeno de *self-trapping* em redes *honeycomb* e quadradas, nós inicialmente analisamos a evolução temporal da função participação $P(t)$ (figura 5.3, a esquerda) e probabilidade de retorno $R(t)$ (figura 5.3, a direita), calculadas para uma rede de $N \times N = 1500 \times 1500$ sítios, uma participação inicial $P(t=0) = 4$, para redes *honeycomb* e quadrada. O estudo comparativo foi realizado ao aumentarmos gradativamente a interação elétron-fônon em ambas as redes.

As figuras 5.3a e 5.3b mostram a evolução temporal da função participação $P(t)$. Para pequenos valores de χ , o que representa fraca interação elétron-fônon, podemos ver que o pacote de onda estende-se continuamente pelas redes, apresentando o mesmo comportamento comportamento típico. Entretanto, a medida que aumenta-se o valor da não linearidade χ , observa-se que o pacote de onda eletrônico é mais susceptível à interação elétron-fônon em redes *honeycomb* que em redes quadradas. Isto fica claro ao observarmos que o pacote de onda é extendido na rede quadrada e localizada na rede hexagonais para $\chi = 35$. Para grandes valores de não linearidade $\chi = 50$, vemos que o acoplamento elétron-fônon torna-se suficientemente forte para promover a localização

Figura 5.3: Evolução temporal da função participação $P(t)$ (a esquerda) e probabilidade de retorno $R(t)$ (a direita), calculadas para uma rede de $N \times N = 1500 \times 1500$ sítios, diferentes valores de acoplamento elétron-fônon $\chi = 20, 35, 50$, para redes *honeycomb* e quadrada. Em todos os casos temos uma participação inicial $P(t=0) = 4$. Ambas as quantidades, $P(t)$ e $R(t)$, indicam que o aumento gradativo da interação elétron-fônon promove o *self-trapping* primeiro na rede *honeycomb*.



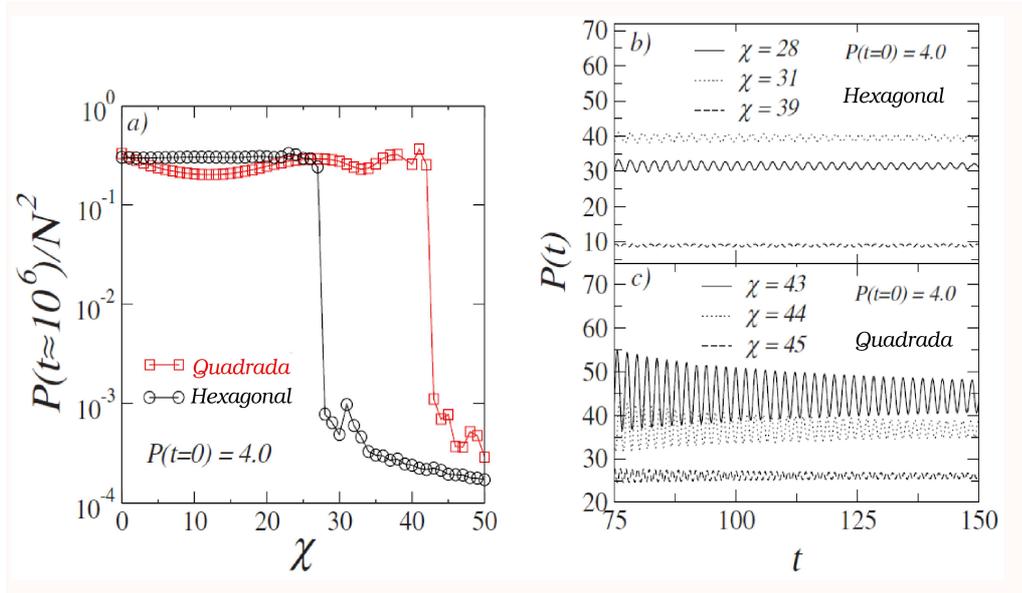
Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [211], adaptado para a língua portuguesa).

do pacote de onda em ambas as redes. Vale destacar que no regime estendido, a função participação satura com um valor da ordem do número de sítios da rede para longos períodos de tempo, quando o pacote de onda chega aos contornos da rede. Esta saturação não é demonstrada nas figuras 5.3.

Uma melhor caracterização do fenômeno de *self-trapping* é obtida ao analisamos a evolução temporal da probabilidade de retorno $R(t)$ (figura 5.3, a direita), para rede *honeycomb* figura 5.3c e quadrada figura 5.3d. Vemos que a probabilidade de encontrar o elétron no sítio inicial diminui com o tempo para valores de interação elétron-fônon pequenos. A medida que aumenta-se o valor de χ observa-se que o valor de $R(t)$ não diminui continuamente com o tempo, o que significa que uma porção do pacote de onda permanece aprisionado nos sítios iniciais. Da mesma forma que observado para a função participação, observa-se que o pacote de onda eletrônico é mais susceptível à interação elétron-fônon em redes *honeycomb* que em redes quadradas. Para forte interação elétron-fônon, o fenômeno é observado em ambas as redes.

Os resultados demonstrados até o presente momento, além de corroborarem entre si, nos indica que o pacote de onda em uma rede tipo *honeycomb* está mais susceptível a sofrer influência da interação elétron fônon que na rede quadrada. Entretanto, para

Figura 5.4: (a) Função participação assintótica normalizada $P(t \approx 10^6)/N^2$ versus o acoplamento não linear χ , considerando um pacote de onda com participação inicial $P(t = 0) = 4$. Observa-se que o self-trapping acontece primeiro na rede hexagonais que na rede quadrada. (b) e (c) apresentam a evolução temporal da função participação nas vizinhanças da transição de *self-trapping* em redes (b) hexagonais e (c) quadradas. Este comportamento oscilatório está relacionado à característica de *breathing* dos pacotes de onda auto-aprisionados (*self-trapped*.)



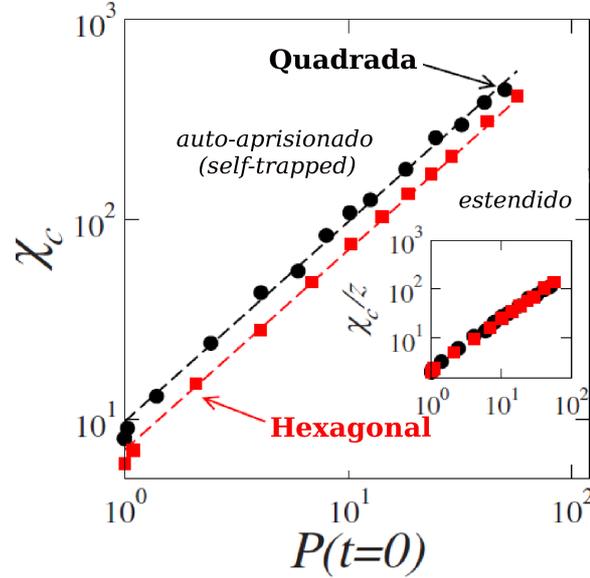
Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [211], adaptado para a língua portuguesa).

fortalecer ainda mais este indicativo, nós reunimos os dados da função participação no limite assintótico $P(t \approx 10^6)/N^2$ em função da não linearidade χ para pacotes de onda com participação inicial $P(t = 0) = 4$ (ver figura 5.4a). Devemos lembrar da definição da função participação, o que nos remete ao fato de que em um tempo muito longo, $P(t) \propto N^0$ indica que o pacote de onda permanece localizado, enquanto que $P(t) \propto N^2$ corresponde a um regime em que o pacote de onda se estende por toda a rede. Podemos ver na figura 5.4a que uma transição de *self-trapping* bem definida é bem observada em ambas as redes. Para não linearidades pequenas, podemos ver que a função participação é da ordem do número de sítios da rede, em ambas as redes. Isto caracteriza um estado estendido. A medida que a interação elétron-fônon cresce, observa-se claramente que a não linearidade crítica para a transição do *self-trapping* é consideravelmente menor em redes *honeycomb* que em redes quadradas. Além disso, são mostrados na figura 5.4b e 5.4c a dependência temporal da função participação de $P(t = 0) = 4$ em redes (b) quadradas e (c) hexagonais. Para não linearidades próximas, um pouco acima dos valores críticos da transição de *self-trapping*, observa-se o caráter tipo *breathing*³ do pacote de onda [215, 223, 224, 225, 226, 227, 228]. Observa-se também nesta figura que a amplitude de oscilação diminui a medida que o sistema vai se aprofundando na fase de auto-aprisionamento (*self-trapped*).

Embora os resultados apresentados até o presente momento já apresentem resultados suficientes para a caracterização do nosso estudo comparativo do fenômeno de auto-

³*Breathing* é caracterizado por oscilações internas do pacote de onda induzidas pela presença de não-linearidade.

Figura 5.5: Diagrama de fase $P(t=0) \times \chi_c$ (participação inicial versus não linearidade crítica) mostrando a transição entre o regime estendido e auto-aprisionado em redes *honeycomb* e quadradas. Em ambos os casos a não linearidade crítica escala linearmente com a função participação inicial. O inset nós reportamos a não linearidade crítica normalizada pelo número de coordenação da rede. O colapso de curvas indica que o número de coordenação da rede é um parâmetro topológico relevante para a transição de *self-trapping*.



Fonte: W.S. Dias, 2010 (referência [211], adaptado para a língua portuguesa).

aprisionamento entre redes quadradas e *honeycomb*, uma melhor qualificação dos resultados pode ser obtida com a diagrama de fase *self-trapped* - estendido para as duas redes. Este diagrama de fase é demonstrado na figura 5.5, onde apresentamos o gráfico $P(t=0) \times \chi_c$ (participação inicial versus não linearidade crítica). Tendo em mente as grandezas probabilidade de retorno e função participação, utilizamos como critério de caracterização de uma fase metálica os fatos de $R(t \approx 10^6) \propto 1/N^2$ e $P(t \approx 10^6) \propto N^2$. Tomando o aumento da interação elétron-fônon, nota-se que independente da largura do pacote de onda, a não linearidade ocorre sempre primeiro em redes *honeycomb* que em redes quadradas. Esta afirmativa vale para todos graus de interação elétron-fônon. Para pacotes de onda estreitos observa-se que a não linearidade que separa as regiões de auto-aprisionamento e estendido é relativamente pequena. Um fato interessante é a observação da linearidade crítica em ambas as redes ser linearmente proporcional ao número de participação inicial $P(t=0)$. Existe uma estreita região do diagrama de fase em que o pacote de onda está auto-aprisionado (*self-trapped*) na rede *honeycomb*, mas não na rede quadrada. Observa-se também que a razão $\chi_c/P(t=0)$ é da ordem da largura de energia de um único elétron. Estes resultados demonstram explicitamente a dependência do fenômeno de *self-trapping* sobre a condição inicial (largura do pacote de onda) e que a topologia de rede é um parâmetro importante nestes estudos. Esta última observação fica mais evidente ao observarmos o inset da figura 5.5, onde plotamos a não linearidade crítica normalizada pelo número de coordenação da rede. Observa-se um colapso das curvas correspondentes as redes quadrada e *honeycomb*, reforçando a importância do número

de coordenação da rede, e conseqüentemente, a topologia da rede, junto aos estudos da transição estendido/*self-trapped*.

5.3 Coexistência de interação elétron-fônon e interação elétron-elétron

Até o presente momento vimos vários trabalhos destinados à compreensão da interação elétron-elétron em sistemas de transporte eletrônica. Mais especificamente, no contexto de interação elétron-elétron, vimos ao longo da seção 2.3.4 e capítulo 4 vários estudos direcionados ao entendimento do papel da interação elétron-elétron junto à sistemas que apresentam desordem composicional e campos elétricos externos. Em sistemas de baixa dimensionalidade, dentro do contexto de coexistência entre desordem e interação elétron-elétron, vários trabalhos relatam o aumento da propagação eletrônica (diminuição da localização de Anderson devido a desordem) em virtude da interação entre elétrons [10, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129]. Por outro lado, ao lidarmos com sistemas que possuem desordem e não linearidade oriunda da interação elétron-fônon, observa-se que os aspectos da não linearidade tem se demonstrado dominantes sobre o papel imposto pela desordem [242, 243, 244, 245]. Podemos citar como exemplo a observação de uma “destruição da localização de Anderson”, onde é observado uma dinâmica subdifusiva do pacote de onda acima de um valor crítico de não linearidade. Diante destas considerações, nossos estudos foram direcionados à influência da interação coulombiana entre os elétrons sobre o fenômeno de *self-trapping* oriundo da interação elétron-fônon.

5.3.1 Dois elétrons interagentes em cadeias não lineares

O modelo de estudo consiste de dois elétrons de spins opostos em uma cadeia cristalina. Estes elétrons possuem uma interação coulombiana entre eles, sendo esta interação *on-site*, assim como a interação de Hubbard (ver seção 2.3.4). Além disso, os elétrons apresentam um acoplamento com as oscilações da rede. Os movimentos relativos entre os dois diferentes pares de base podem ser representados por modos de fônons acústicos e ópticos. Desta forma, os termos de potencial e de *hopping* do hamiltoniano dependem destas vibrações, em principio. Estas considerações nos leva a um hamiltoniano $H = H_{phonon} + H_{electron-phonon}$ do sistema dado por

$$\begin{aligned}
H = & \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_s^2 (u_{n+1} - u_n)^2 \right\} + \sum_n \left\{ \frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 \nu_n^2 \right\} \\
& + \sum_n \alpha (V_0 + u_{n+1} - u_n) (c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n) + \sum_m \alpha (V_0 + u_{m+1} - u_m) (c_{m+1}^\dagger c_m + c_{m-1}^\dagger c_m) \\
& + \sum_n (\epsilon_n + \gamma_n \nu_n) c_n^\dagger c_n + \sum_m (\epsilon_m + \gamma_m \nu_m) c_m^\dagger c_m + \sum_n U c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \quad (5.23)
\end{aligned}$$

Aqui u_n and ν_n são deslocamentos da rede e coordenadas e vibrações internas da n -ésima célula unitária, respectivamente. p_n and P_n são, em ordem, seus momentos conjugados. M é a massa da célula unitária, enquanto ω_0 e ω_s são as frequências de oscilação dos fônons

ópticos e acústicos respectivamente. $c_{n(m)}^\dagger$ e $c_{n(m)}$ são os operadores criação e aniquilação para o elétron no sítio $n(m)$. α e $\gamma_{m(n)}$ são as constantes de acoplamento, enquanto V_0 é o termo de hopping. $\epsilon_{m(n)}$ são as energias *on-site* e U é a interação elétron-elétron.

Para que possamos seguir a evolução temporal dos pacotes de onda, nós resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo, expandindo a função de onda na representação de Wannier $|\Phi(t)\rangle = \sum_{n,m} \phi_{n,m}(t) |n s_1, m s_2\rangle$. A partir disto, nós obtemos as equações de movimento:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} + \omega_s^2 [2u_n(t) - u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)] &= \frac{2\alpha}{M} \Re[f_{n+1,m}^*(t)f_{n,m}(t) - f_{n-1,m}^*(t)f_{n,m}(t) \\ &+ f_{n,m+1}^*(t)f_{n,m}(t) - f_{n,m-1}^*(t)f_{n,m}(t)] \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\frac{d^2 \nu_n(t)}{dt^2} + \omega_0^2 \nu_n(t) = \gamma_n \sum_m |f_{n,m}(t)|^2 \quad (5.25)$$

$$\frac{d^2 \nu_m(t)}{dt^2} + \omega_0^2 \nu_m(t) = \gamma_m \sum_n |f_{n,m}(t)|^2 \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{df_{n,m}(t)}{dt} &= [\epsilon_n + \gamma_n \nu_n(t)] f_{n,m}(t) + [\epsilon_m + \gamma_m \nu_m(t)] f_{n,m}(t) \\ &+ \sum_{p,n} t_{p,n} f_{p,n}(t) + \sum_{p,m} t_{p,m} f_{p,m}(t) + \delta_{n,m} U f_{n,m}(t) \end{aligned} \quad (5.27)$$

onde $t_{p,n} = \alpha(V_0 + u_p - u_n)$ e $t_{p,m} = \alpha(V_0 + u_p - u_m)$. Nós assumimos que a dependência dos termos de *hopping* sobre u_n é tão fraco que pode ser desprezado, além da existência de um *hopping* de primeiros vizinhos, ou seja, $t_{p,n(m)} = -T$ se $|p - n(m)| = 1$ e zero de outra forma. Desta forma nós obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{df_{n,m}}{dt} &= [\epsilon_n + \gamma_n \nu_n(t) + \epsilon_m + \gamma_m \nu_m(t)] f_{n,m} \\ &- T [f_{n-1,m}(t) + f_{n+1,m}(t) + f_{n,m-1}(t) + f_{n,m+1}(t)] + \delta_{n,m} U f_{n,m} \end{aligned} \quad (5.28)$$

Assumindo que as vibrações moleculares da rede chegam ao equilíbrio em uma escala de tempo muito inferior que a escala de evolução temporal do pacote de onda eletrônico, nós obtemos

$$\omega_0^2 \nu_n = \gamma_n \sum_m |f_{n,m}(t)|^2 \quad \text{e} \quad \omega_0^2 \nu_m = \gamma_m \sum_n |f_{n,m}(t)|^2$$

Substituindo a equação 5.29 na equação 5.28 obtém-se

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{df_{n,m}}{dt} &= [\epsilon_n + \epsilon_m] f_{n,m}(t) + \left[\frac{\gamma_n^2}{\omega_0^2} \sum_m |f_{n,m}(t)|^2 + \frac{\gamma_m^2}{\omega_0^2} \sum_n |f_{n,m}(t)|^2 \right] f_{n,m}(t) \\ &- T [f_{n-1,m}(t) + f_{n+1,m}(t) + f_{n,m-1}(t) + f_{n,m+1}(t)] + \delta_{n,m} U f_{n,m} \end{aligned} \quad (5.29)$$

ou

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{df_{n,m}}{dt} &= [\epsilon_n + \epsilon_m] f_{n,m}(t) + \left[\chi \sum_m |f_{n,m}(t)|^2 + \chi \sum_n |f_{n,m}(t)|^2 \right] f_{n,m}(t) \\ &- T [f_{n-1,m}(t) + f_{n+1,m}(t) + f_{n,m-1}(t) + f_{n,m+1}(t)] + \delta_{n,m} U f_{n,m} \end{aligned} \quad (5.30)$$

Utilizamos em nossos cálculos $\hbar = T = 1$ e consideramos os potenciais *on-site* $\epsilon_n = 0$. Nós empregamos o método Runge-Kutta de oitava-ordem para integrar a equação 5.30, obtendo assim as amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado. Nós acompanhamos a evolução temporal de pacotes de onda tipo delta ($f_{n_1, n_2} = \delta_{n_1, n_1^0} \delta_{n_2, n_2^0}$), sendo a posição inicial dos elétrons (n_1^0, n_2^0) organizada de forma que os elétrons estejam dispostos inicialmente equidistantes do centro da cadeia ($\frac{N}{2} - d_0, \frac{N}{2} + d_0$). Durante a evolução temporal foi acompanhado a norma da função de onda em todo o intervalo de tempo requisitado, de maneira que a precisão $|1 - |\Phi(t)|^2| < 10^{-9}$.

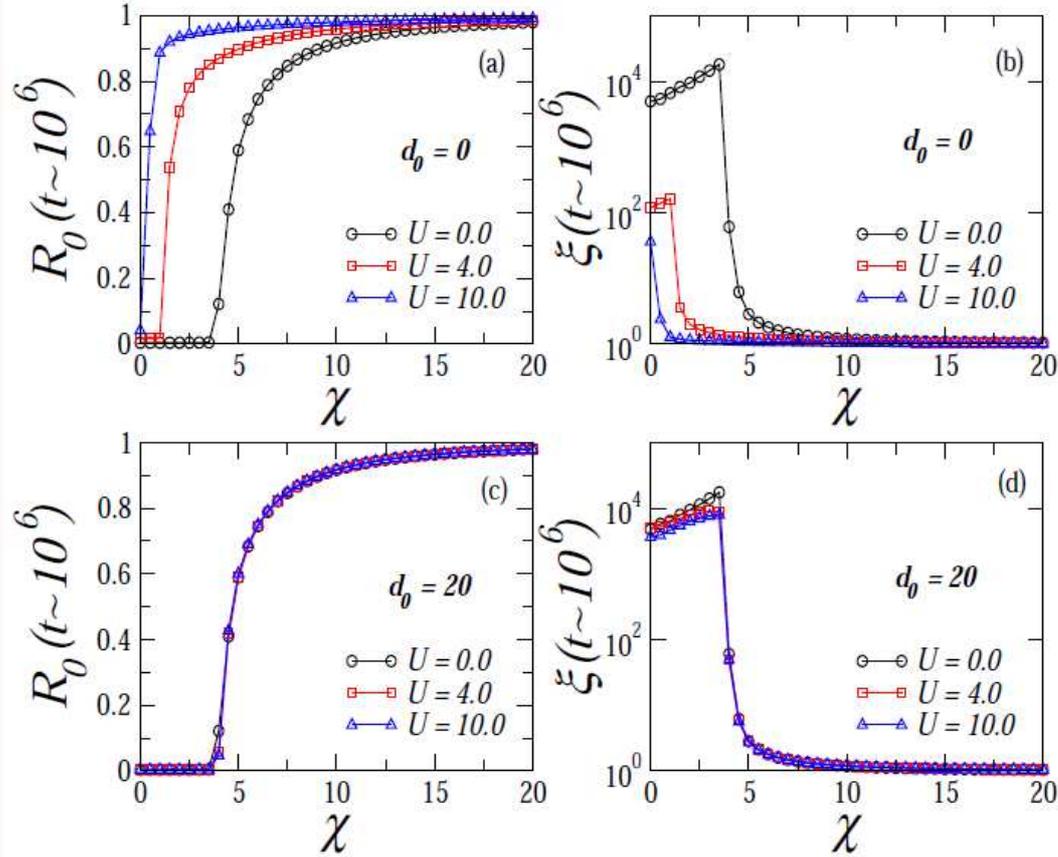
Assim como nos trabalhos anteriores, tomamos como medidas do grau localização (auto-localização) do pacote a função participação $\xi(t) = 1/|\sum_{n,m} f_{n_1, n_2}(t)|^4$ e a probabilidade de retorno $R_0(t) = |f_{n_1^0, n_2^0}(t)|^2$. Como discutido anteriormente, $R_0(t)$ informa-nos a probabilidade de encontrar o elétron na posição inicial e a função participação nos dá uma estimativa do número de sítios sobre o qual o pacote de onda visitou até o tempo t . A integração da equação 5.30, obtendo assim as amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado, foi tomada até que $t \approx 10^6$. Desta forma, garantimos que $R_0(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ está relacionado a um caráter estendido do sistema, enquanto que uma probabilidade de retorno saturada num valor finito indica um pacote de onda localizado/aprisionado. A mesma análise vale para a função participação, ou seja, $\xi(t \rightarrow \infty) \propto N^2$ indica um regime em que o pacote de onda se estende por toda a rede.

5.3.2 Resultados

Seguindo a mesma abordagem do problema anterior (seção 5.3), nós seguimos a evolução temporal do pacote de onda eletrônico, observando as grandezas participação e probabilidade de retorno. Entretanto, vale destacar que se trata de um sistema com várias variáveis, torna-se um pouco mais trabalhosa a análise e caracterização do comportamento eletrônico do sistema. Visto que o objetivo é descobrir a influência da interação elétron-elétron sobre a dinâmica do pacote de onda com a existência de não linearidade, nós coletamos diversos cálculos da probabilidade de retorno $R_0(t)$ e função participação $\xi(t)$ para tempos longos ($t \approx 10^6$), tendo uma escala de não linearidade, três valores de interação elétron-elétron ($U = 0, 4, 10$), com a posição inicial como sendo a mesma (d_0) e afastados um do outro ($d_0 = 20$). A coleta destes dados foi organizada como se pode ver na figura 5.6, onde estão apresentadas a probabilidade de retorno $R_0(t \approx 10^6)$ e função participação $\xi(t \approx 10^6)$ versus a não linearidade χ .

Nas figuras 5.6a,b, onde $d_0 = 0$, ou seja, os elétrons estão inicialmente no mesmo sítio, vemos que a medida que a interação elétron-elétron cresce, os valores de acoplamento elétron-fônon necessários para o aparecimento do auto-aprisionamento (*self-trapping*) são cada vez menores. Com o objetivo de reforçar o entendimento, deve-se lembrar que $R_0(t \approx 10^6) \rightarrow 0$ está relacionado a um caráter estendido do sistema, enquanto que uma probabilidade de retorno saturada num valor finito indica um pacote de onda localizado/aprisionado. A mesma análise vale para a função participação, ou seja, $\xi(t \approx 10^6) \propto N^2$ indica um regime em que o pacote de onda se estende por toda a rede. Nota-se transições de *self-trapping* bem definidas. O papel desempenhado pela interação

Figura 5.6: Probabilidade de retorno para tempo longo ($R_0(t \approx 10^6)$) versus χ para pacotes de onda (a) inicialmente no mesmo sítio ($d_0 = 0$) e (c) inicialmente distantes ($d_0 = 20$). Em (b) e (d) tem-se a função participação para as mesmas condições iniciais que (a) e (c), respectivamente. Os resultados sugerem que a presença de interação promove o self-trapping não linearidades menores.

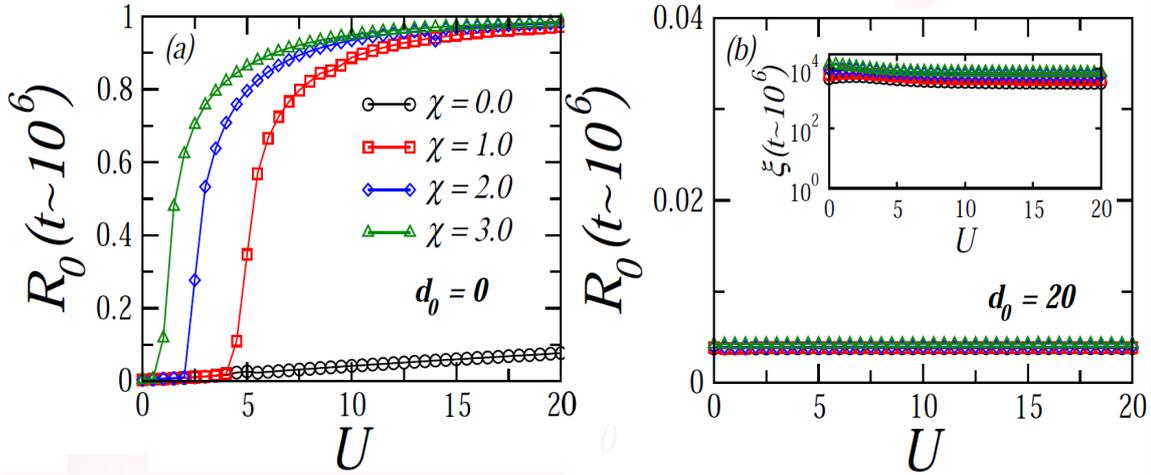


Fonte: Autor, 2011.

elétron-elétron fica ainda mais evidente ao observarmos os mesmos cálculos para elétrons inicialmente distantes $d_0 = 20$ (ver figura 5.6c,d). O colapso dos dados para a probabilidade de retorno $R_0(t \approx 10^6) \rightarrow 0$ e função participação $\xi(t \approx 10^6)$ sugere que a interação elétron-elétron não desempenha papel significativo sobre o *self-trapping* neste caso. Como os elétrons estão inicialmente distantes, visto que a interação elétron-elétron é *on-site*, os estados ligados oriundos da interação elétron-elétron não desempenham nenhum papel sobre a dinâmica dos pacotes de onda. Os pacotes de onda eletrônicos tornam-se aprisionados acima de um valor de não linearidade crítica da ordem da largura da banda de um elétron, concordando com os resultados da literatura.

Visto o indicativo que a interação favorece o *self-trapping*, nós calculamos a probabilidade de retorno assintótica $R_0(t \approx 10^6)$ versus interação U (ver figura 5.7), com não linearidade $\chi = 0, 1, 2, 3$ e pacotes de onda (a) inicialmente no mesmo sítio ($d_0 = 0$) e (b) inicialmente distantes ($d_0 = 20$). Observa-se neste caso, para $d_0 = 0$, que a medida que aumentamos o valor da não linearidade, o auto-aprisionamento acontece para menores valores de interação. Em outras palavras, a não linearidade crítica que separa as regiões onde o pacote de onda apresenta um regime delocalizado/auto-aprisionado diminui a me-

Figura 5.7: Probabilidade de retorno para tempo longo $R_0(t \approx 10^6)$ versus interação U , com não linearidade $\chi = 0, 1, 2, 3$ e pacotes de onda (a) inicialmente no mesmo sítio ($d_0 = 0$) e (b) inicialmente distantes ($d_0 = 20$). Para pacotes de onda inicialmente dispostos no mesmo sítio, vemos que a medida que aumentamos o valor da não linearidade, observa-se o auto-aprisionamento para menores valores de interação.



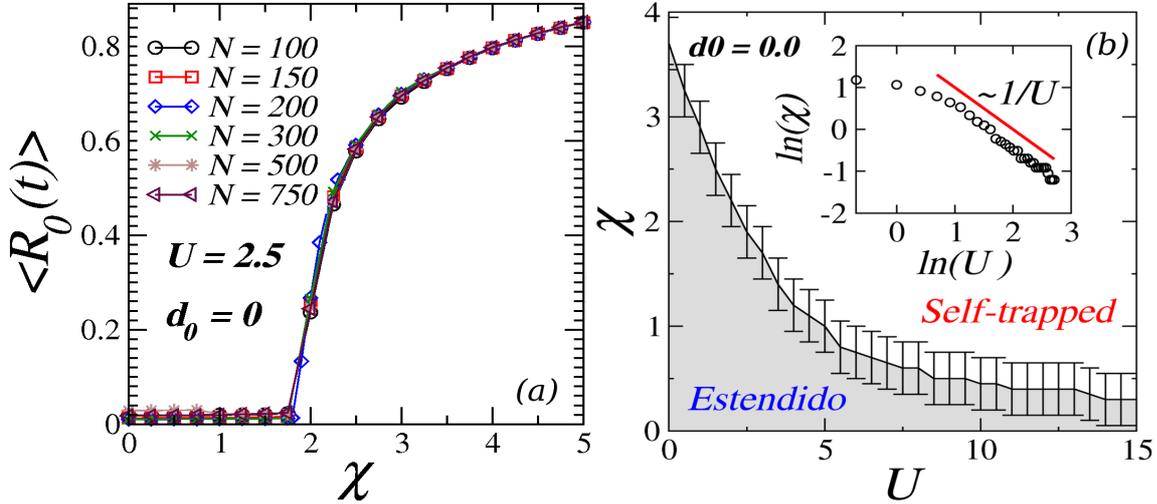
Fonte: Autor, 2011.

didada que aumenta-se a interação entre os elétrons. Mesmo para valores fracos de interação elétron-fônon, nota-se a existência do *self-trapping*. O pequeno aumento na probabilidade de retorno assintótica com o aumento de U para $d_0 = 0$ e $\chi = 0$ é promovido somente pela interação. Este fenômeno foi relatado anteriormente nas seções 4.2.1 e 4.3.1. Para elétrons inicialmente distantes ($d_0 = 20$) este resultado fica mais evidente, observando $R_0(t \approx 10^6)$ e $\xi(t \approx 10^6)$ na figura 5.7b e *inset*, respectivamente. Observa-se que no regime de fraco acoplamento elétron fônon ($\chi = 0, 1, 2, 3$), a probabilidade de retorno para tempos longos é muito pequena ($R_0(t \approx 10^6) \rightarrow 0$) e a função participação é da ordem do espaço de Hilbert $\xi(t \approx 10^6) \propto N^2$, caracterizando a extensividade do pacote de onda por toda a cadeia. O colapso de dados mais uma vez indica que a interação não desempenha papel relevante para elétrons suficientemente distantes.

A qualificação da região crítica que separa regiões em que o pacote de onda está localizado de regiões em que o mesmo encontra-se auto-aprisionado é melhor entendida e detalhada ao tomarmos a análise de escala de tamanhos finitos. Neste caso, nós calculamos a probabilidade de retorno $R_0(t)$ até $t_{max} \approx 10^6$ para cadeias de diferentes tamanhos ($N = 100, 150, \dots, 750$ sítios), para uma escala de valores de interação elétron-fônon χ , desde $\chi = 0$ à $\chi = 5$. Visto que o objetivo é a análise do papel desempenhado pela interação elétron-elétron, consideramos $d_0 = 0$ e uma escala de valores de interação elétron-elétron U .

Na figura 5.8a nós vemos o gráfico $R_0(t \approx 10^6)$ versus χ para $U = 2.5$, $d_0 = 0$ e cadeias de $N = 100, \dots, 750$ sítios. Nota-se que, independente do tamanho da cadeia, para $\chi \geq 1.85(5)$ a probabilidade de retorno é finita, indicando o regime de *self-trapped*. Para $\chi < 1.8$, a probabilidade de retorno assintótica é desprezavelmente pequena (da ordem de $1/N$), caracterizando o regime delocalizado (estados estendidos). Através do

Figura 5.8: (a) Probabilidade de retorno reescalada para tempo longo ($R_0(t \approx 10^6)/N$) versus χ , com $U = 2.5$, $d_0 = 0$ e diversos tamanhos de cadeia. Para $\chi \geq 1.85(5)$ a probabilidade de retorno é finita, indicando o regime de self-trapping. (b) Diagrama de fase em χ versus U , delimitando as regiões de self-trapping e delocalizada. Na ausência de interação elétron-fônon, a não linearidade crítica é da ordem da largura da banda. A medida que U cresce, observa-se uma diminuição da não linearidade crítica χ_c .



Fonte: Autor, 2011.

diagrama de fase χ versus U (figura 5.8b) podemos ver as regiões delocalizadas e de *self-trapping*, delimitadas pela não linearidade crítica χ_c . Na ausência de acoplamento elétron-elétron, a não linearidade crítica acima da qual o pacote de onda encontra-se aprisionado é da ordem da largura da banda de um único elétron [24, 25, 26]. Este resultado está em concordância com resultados anteriores, pois na ausência de interação os elétrons tornam-se independentes ou não-correlacionados. Quanto a interação elétron-elétron está presente a não linearidade crítica diminui. Observa-se que no regime de elétrons fortemente correlacionados (grandes valores de U), a não linearidade crítica diminui com $1/U$ (ver *inset*). Este comportamento é explicado ao lembrar que os estados ligados de dois elétrons estão na faixa de energia $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16}$, que também tem uma diminuição da largura da ordem de $1/U$ para fortes interações elétron-elétron. Vemos assim que os estados ligados de dois elétrons possuem um grande papel sobre a dinâmica dos pacotes de onda, sendo capaz de promover o aprisionamento deste mesmo para fracos valores de acoplamento elétron-fônon.

6

Conclusões

Ao longo deste trabalho foram relatados vários trabalhos voltados ao estudo de transporte eletrônico. É notável o surgimento de novos ingredientes, visando cada vez mais a compreensão e aprimoramento do conhecimento sobre o comportamento de elétrons em diversos sistemas. Dentro deste contexto, escolhemos o tema da presente tese: Efeito da interação entre partículas e/ou quasipartículas em sistemas de baixa dimensionalidade. A seguir apresentaremos sucintamente os resultados obtidos nos sistemas abordados ao longo do corpo da tese.

Primeiramente, no capítulo 3 nós tratamos um sistema de excitações coletivas de spin $S = 1/2$ em sistemas unidimensionais. Mais especificamente, nós tratamos um sistema quântico de spins ferromagnéticos cujos acoplamentos entre os spins apresentam uma distribuição aleatória com correlação de longo-alcance. Neste sistema, são estimuladas duas excitações magnéticas ou dois “*spin-flips*”, dando origem a duas excitações coletivas, conhecidas como mágnons. Os efeitos de interação surgem ao proibirmos a dupla excitação em um único spin, visto que se trata de um sistema de spin $S = 1/2$. Nossos estudos são inicialmente direcionados à caracterização da natureza dos auto-estados de dois mágnons. Para isto, foi resolvida a equação de Schrödinger independente do tempo. Em seguida foi investigado a evolução temporal de um pacote de onda formado por dois “*spin-flips*” para uma distância inicial entre eles dada por d_0 . Estes resultados são revelados após a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Em resumo, vemos que os estados de dois mágnons permanecem exponencialmente localizados quando o sistema está fracamente correlacionado ($\alpha < 2$), similar a localização de Anderson para uma excitação coletiva de spin. Ao contrário, ondas de spin estendidas são observadas na presença de forte correlação na distribuição dos potenciais ($\alpha > 2$). Associado a estes estados estendidos, o pacote de onda apresenta um alargamento balístico, contrastando com a dinâmica difusiva para sistemas com desordem não correlacionada. Foi demonstrado também que o pacote de onda de um único mágnon apresenta um aspecto assimétrico devido à interação efetiva entre os mágnons em virtude da repulsão cinemática entre os mágnons. O efeito combinado da repulsão cinemática e a dinâmica balística em um regime fortemente correlacionado permite a observação de correlações entre os spins que são substancialmente maiores que o observado em cadeias ferromagnéticas com desordem não correlacionada. Esperamos que este trabalho estimule estudos posteriores para excitações

magnéticas em outros sistemas, como sistemas anti-ferromagnéticos, sistemas com spin de maior ordem e sistemas 2D e 3D.

No capítulo 4 nós tratamos o problema de dois elétrons interagentes em sistemas unidimensionais. A interação entre os dois elétrons de spins opostos é de origem coulombiana e *on-site*, ou seja, a interação ocorre somente quando os dois elétrons estão no mesmo sítio atômico. Avaliamos os estados eletrônicos e o comportamento dinâmico dos pacotes de onda eletrônico em cadeias cristalinas e com desordem correlacionada de longo alcance na distribuição dos potenciais. Isto foi possível mediante as soluções das equações de Schrödinger independente e dependente do tempo, respectivamente. Além disso, em ambas as cadeias, nós investigamos a influência de um campo elétrico externo constante sobre o comportamento dinâmico dos pacotes de onda. No primeiro trabalho, destinado ao problema em cadeias cristalinas, observa-se que, independente do valor da interação entre os elétrons, a largura do pacote de onda alarga-se balisticamente. Entretanto, a dinâmica da função participação apresenta um comportamento não usual a medida que a interação elétron-elétron aumenta: deixa de ter um comportamento balístico $P(t) \propto t^2$ para $U = 0$ para um comportamento difusivo $P(t) \propto t$ a medida que U cresce. Este comportamento está relacionado aos estados ligados que surgem na presença de interação entre os elétrons, responsável por correlacionar a dinâmica dos dois elétrons. Os estados ligados dá origem também a uma assinatura sobre a estrutura do pacote de onda gaussiano, desenvolvendo uma estrutura dividida. A região central com uma densidade eletrônica concentrada na região inicial e duas frentes de onda, uma para cada lado. Já com a presença do campo elétrico, observa-se que a amplitude de oscilação do pacote de onda eletrônico apresenta diferentes aspectos para pacotes de onda gaussianos e tipo delta. Para os últimos observa-se que a amplitude de oscilação exibe um máximo para valores de interação finitas e amplitudes desprezíveis no limite de $U \rightarrow 0$ e $U \rightarrow \infty$. Por outro lado, duas tendências distintas são observadas para pacotes de onda gaussianos: um regime com amplitude de oscilação finita típica de elétrons não interagentes; e um mínimo da amplitude de oscilação para um valor finito de interação, quando a banda de estados ligados de dois elétrons desempenha importante papel sobre a dinâmica dos elétrons. Neste regime, os estados ligados são responsáveis por oscilações de Bloch com uma frequência dobrada, onde os elétrons comportam-se como um único elétron de carga $2e$. Por fim, nós mostramos a reamplificação do regime do modo com frequência dobrada por promover uma forte superposição entre a distribuição espectral do pacote de onda e a banda de estados ligados.

Para o segundo modelo, em que há uma distribuição de energias com desordem correlacionada de longo alcance, observa-se autoestados estendidos em torno do centro da banda no regime de fortes correlações ($\alpha > 2$). Neste regime, observa-se também um aprisionamento de uma porção finita e pequena do pacote de onda em torno da sua posição inicial. A presença de campo elétrico induz a uma localização dinâmica do pacote de onda. Quando o sistema está no regime fracamente correlacionado ($\alpha < 2$) as oscilações não são coerentes, diferente do observado para ($\alpha > 2$), onde as oscilações são coerentes, como oscilações de Bloch com frequência de oscilação bem definida. Na presença de interação com valores próximos a $U \approx 4$ observa-se o fenômeno de dobramento de frequência, ou seja, a frequência característica das oscilações de Bloch são 2 vezes maior.

A análise dos autoestados de dois elétrons, observou-se que os estados próximos a centro da banda são altamente degenerados, com estados de dois elétrons estendidos e localizados coexistindo. Este fator contrasta com o comportamento usual de sistemas de um elétron no quais estados localizados e estendidos podem ser separados por *mobility edges*. Esta degenerescência tem impacto sobre a estatística do espaçamento de níveis. A presença de estados estendidos é irrelevante, com uma função distribuição sendo bem descrita por uma superposição de um pico tipo delta e um decaimento poissoniano. Observa-se que a interação elétron-elétron correlaciona a função de onda eletrônica, reduzindo a degenerescência dos níveis de energia. Neste caso, a distribuição de espaçamentos de níveis reassume seu aspecto poissoniano usual.

Por fim, no capítulo 5, nós tratamos a ação de outro tipo de interação sobre a dinâmica do pacote de onda eletrônico. Assumindo que os íons da rede possuem um pequeno movimento oscilatório em torno do ponto de equilíbrio, torna-se necessário levar em consideração a existência de modos vibracionais da rede, ou seja, a existência de fônons. A interação da função de onda eletrônica com esta rede que possui estes modos de vibração dá origem a um tipo de interação, conhecida usualmente como interação elétron-fônon. Esta interação, após exceder um valor crítico, promove uma localização do pacote de onda eletrônico conhecido como *self-trapping* [21, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Dentro deste contexto, nossos estudos foram direcionados a dois modelos. No primeiro nós realizamos um estudo comparativo do fenômeno de *self-trapping* em redes 2D quadradas e honeycomb. Considerando sistemas cristalinos, nós mostramos a dependência do fenômeno com a topologia da rede. Mostramos que o parâmetro crítico da interação elétron-fônon que governa o *self-trapping* escala linearmente com a função participação inicial independente do tipo de rede. Além disso, mostramos que o número de coordenação da rede é um parâmetro topológico importante para a transição *self-trapping*. No segundo modelo nós investigamos a coexistência de interação elétron-elétron e interação elétron-fônon numa cadeia cristalina, considerando um sistema de dois elétrons de spins opostos. Resolvendo numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo e seguindo a evolução temporal do pacote de onda dos dois elétrons, nós exploramos o comportamento assintótico da probabilidade de retorno e função participação para melhor caracterizarmos o estado do pacote de onda. Nós mostramos que a interação elétron-elétron tem influência desprezível sobre a dinâmica dos pacotes de onda quando os mesmos estão inicialmente dispostos distantes um dos outros. O acoplamento elétron-fônon necessário para aprisionar os pacotes de onda é o mesmo observado para sistemas de elétrons independentes (sistemas de um elétron). Entretanto, quando os dois elétrons estão dispostos inicialmente no mesmo sítio, nossos resultados mostram que a magnitude da interação elétron-fônon necessária para promover o *self-trapping* é menor quanto maior for o valor da interação elétron-elétron. Vemos assim que a interação elétron-elétron desempenha um importante papel na dinâmica eletrônica com interação elétron-fônon, agindo como um importante mecanismo para a localização eletrônica em sistemas fortemente correlacionados.

Em síntese, acreditamos que todos os estudos apresentados no corpo desta tese possam contribuir para o entendimento de classes de sistemas de transporte eletrônico e excitações magnéticas semelhantes, em que envolvam: desordem, campo externo, não linearidade e interações. De fato, os modelos e estudos aqui apresentados apresentam a fenomenologia

observada em alguns sistemas de transporte eletrônico e excitações magnéticas. Dentro deste contexto, temos como perspectiva o desenvolvimento de outros modelos que contemplem a descrição e/ou entendimento de outros sistemas, bem como o desenvolvimento de modelos e estudos mais precisos que relacionem sistemas de baixa densidade eletrônica e sistemas de muitas partículas.

Referências Bibliográficas

- [1] Mott, N. F. and Peierls, R. *Proceedings of the Physical Society of London* **49**, 72 (1937).
- [2] de Boer, J. H. and Verwey, E. J. W. *Proceedings of the Physical Society of London* **49**, 59 (1937).
- [3] Mott, N. F. *Proceedings of the Physical Society of London Series A* **416**, 62 (1949).
- [4] Hubbard, J. *Proceedings of the Physical Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences* **276**, 238 (1963).
- [5] Lieb, E. H. and Liniger, W. *Physical Review* **130**, 1605 (1963).
- [6] Lieb, E. *Physical Review* **130**, 1616 (1963).
- [7] Lieb, E. H. and Wu, F. *Physical Review Letters* **20**, 1445 (1968).
- [8] Yang, C. N. *Physical Review Letters* **19**, 1312 (1967).
- [9] Lieb, E. H. and Wu, F. Y. *Physica A- Statistical Mechanics and its Applications* **321**, 1 (2003).
- [10] Shepelyansky, D. L. *Physical Review Letters* **73**, 2607 (1994).
- [11] Cohen, Y. P., Hitchcock, J., Dries, D., Junker, M., Welford, C., and Hulet, R. G. *Physical Review A* **77**, 033632 (2008).
- [12] Deissler, B., Zaccanti, M., Roati, G., D'Errico, C., Fattori, M., Modugno, M., Modugno, G., and Inguscio, M. *Nature Physics* **6**, 354 (2010).
- [13] Fallani, L., Lye, J. E., Guarrera, V., Fort, C., and Inguscio, M. *Physical Review Letters* **98**, 130404 (2007).
- [14] White, M., Pasienski, M., McKay, D., Zhou, S. Q., Ceperley, D., and DeMarco, B. *Physical Review Letters* **102**, 055301 (2009).
- [15] Anderson, P. W. *Physical Review* **109**, 1492 (1958).

- [16] Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciardello, D. C., and Ramakrishnan, T. V. *Physical Review Letters* **42**, 673 (1979).
- [17] Lee, P. A. and Ramakrishnan, T. V. *Reviews of Modern Physics* **57**, 287 (1985).
- [18] Baranovski, S., editor. *Charge Transport in Disordered Solids with Applications in Electronics*. John Wiley & Sons, Ltd, (2006).
- [19] Holstein, T. D. *Annals of Physics Letters A* **8**, 325 (1959).
- [20] Holstein, T. D. *Annals of Physics* **281**, 725 (2000).
- [21] Kenkre, V. M. and Campbell, D. K. *Physical Review B* **34**, 4959 (1986).
- [22] Kenkre, V. M. and Wu, H. L. *Physical Review B* **39**, 4959 (1989).
- [23] Grigolini, P., Wu, H. L., and Kenkre, V. M. *Physical Review B* **40**, 7045 (1989).
- [24] Datta, P. K. and Kundu, K. *Physical Review B* **53**, 14929 (1996).
- [25] Johansson, M., Hörnquist, M., and Riklund, R. *Physical Review B* **52**, 231 (1995).
- [26] Pan, Z., Xiong, S., and Gong, C. *Physical Review E* **56**, 4744 (1996).
- [27] Ivanchenko, M. V. *Physical Review Letters* **102**, 175507 (2009).
- [28] Flach, S., Krimer, D. O., and Skokos, C. *Physical Review Letters* **102**, 024101 (2009).
- [29] Skokos, C., Krimer, D. O., Komineas, S., and Flach, S. *Physical Review E* **79**, 056211 (2009).
- [30] Köhl, M., Moritz, H., Stöferle, T., Günter, K., and Esslinger, T. *Physical Review Letters* **94**, 080403 (2005).
- [31] Bloch, I., Dalibard, J., and Zwerger, W. *Reviews of Modern Physics* **80**, 885 (2008).
- [32] Morsch, O. and Oberthaler, M. *Reviews of Modern Physics* **78**, 179 (2006).
- [33] Liz-Marzán, L. M. and Giersig, M., editors. *Low-dimensional systems: theory, preparation, and some applications*. Kluwer Academic Publishers, (2003).
- [34] Ferry, D. K. and Goodnick, S. M. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, (1997).
- [35] Barnham, K. and Vvedensky, D., editors. *Low-dimensional semiconductor structures: fundamentals and device applications*. Cambridge University Press, (2001).
- [36] Drude, P. *Annalen der Physik* **566**, 306 (1900).
- [37] Drude, P. *Annalen der Physik* **308**, 369 (1900).
- [38] Franz, R. and Wiedemann, G. *Annalen der Physik* **165**, 497 (1853).

- [39] Sommerfeld, A. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **47**, 1 (1927).
- [40] Bloch, F. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **52**, 555 (1928).
- [41] Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, (1976).
- [42] Wilson, A. H. *Proceedings of the Physical Society of London* **A133**, 458 (1931).
- [43] Morse, P. M. *Physical Review* **35**, 1310 (1930).
- [44] Peierls, R. *Annalen der Physik* **4**, 121 (1930).
- [45] Sapoval, B. and Hermann, C. *Physics of Semiconductors*. Springer, (1988).
- [46] Imada, M., Fujimori, A., and Tokura, Y. *Reviews of Modern Physics* **70**, 1039 (1998).
- [47] Gebhard, F. *The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods*. Springer, (1997).
- [48] Mott, N. F. and Alexandrov, A. S., editors. *Sir Newill Mott - 65 years in physics*. World Scientific Publishing, (1995).
- [49] Mott, N. *Metal-Insulator transitions*. Taylor & Francis, (1990).
- [50] Mott, N. F. and Twose, W. D. *Advances in Physics* **10**, 107 (1961).
- [51] Borland, R. E. *Proceedings of the Royal Society A* **13**, 274 (1963).
- [52] Mott, N. F. *Advances in Physics* **16**, 49 (1967).
- [53] Cohen, M. H., Fritzsche, H., and Ovshinsky, S. R. *Physical Review Letters* **22**, 1065 (1969).
- [54] Edwards, J. T. and Thouless, D. J. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **5**, 807 (1972).
- [55] Thouless, D. J. *Physics Reports* **13**, 93 (1974).
- [56] Licciardello, D. C. and Thouless, D. J. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **8**, 4157 (1975).
- [57] Brandes, T. and Kettemann, S., editors. *Anderson localization and Its Ramifications*. Springer, (2003).
- [58] Kramer, B. and MacKinnon, A. *Reports on Progress in Physics* **56**, 1469 (1993).
- [59] Evers, F. and Mirlin, A. D. *Reviews of Modern Physics* **80**, 1355 (2008).
- [60] Zallen, R. *The Physics of Amorphous Solids*. Wiley Classics Library, (1998).
- [61] Abrahams, E., editor. *50 years of the Anderson Model*. World Scientific Publishing, (2010).

- [62] Brandes, T. and Kettmann, K., editors. *Anderson Localization and Its ramifications: disorder, phase coherence and electron correlations*. Springer, (2003).
- [63] Binder, K. and Kob, W. *Glassy materials and disordered solids*. World Scientific Publishing, (2005).
- [64] Arya, K., Su, Z. B., and Birman, J. L. *Physical Review Letters* **57**, 2725 (1986).
- [65] Drake, J. M. and Genack, A. Z. *Physical Review Letters* **63**, 259 (1989).
- [66] Economou, E. N. and Soukoulis, C. M. *Physical Review B* **40**, 7977 (1989).
- [67] Wiersma, D. S., Bartolini, P., Lagendijk, A., and Righini, R. *Nature* **390**, 671 (1997).
- [68] Schwartz, T., Bartal, G., Fishman, S., and Segev, M. *Nature* **446**, 52 (2007).
- [69] Nascimento, E. M., de Moura, F. A. B. F., and Lyra, M. L. *Physical Review B* **76**, 115120 (2007).
- [70] van Rossum, M. C. W. and Nieuwenhuizen, T. M. *Reviews of Modern Physics* **71**, 313 (1999).
- [71] Condat, C. A. and Kirkpatrick, T. R. *Physical Review B* **32**, 495 (1985).
- [72] Cohen, S. M. and Machta, J. *Physical Review Letters* **54**, 2242 (1985).
- [73] Shahbazi, F., Bahraminasab, A., Allaei, S. M. V., Sahimi, M., and Tabar, M. R. R. *Physical Review Letters* **94**, 165505 (2005).
- [74] Maynard, J. D. *Reviews of Modern Physics* **73**, 401 (2001).
- [75] Lewensteind, M., Sanpera, A., Ahufinger, V., Damski, B., Sen(DE), A., and Sen, U. *Advances in Physics* **56**, 243 (2007,).
- [76] Damski, B., Zakrzewski, J., Santos, L., Zoller, P., and Lewenstein, M. *Physical Review Letters* **91**, 080403 (2003).
- [77] Roati, G., DâErrico, C., Fallani, L., Fattori, M., Fort, C., Zaccanti, M., Modugno, G., Modugno, M., and Inguscio, M. *Nature* **453**, 895 (2008|).
- [78] Billy, J., Josse, V., Zuo, Z., Bernard, A., Hambrecht, B., Lugan, P., Clément, D., Sanchez-Palencia, L., Bouyer, P., and Aspect, A. *Nature* **453**, 891 (2008).
- [79] Dean, P. *Proceedings of the Physical Society* **84**, 727 (1964).
- [80] Matsuda, H. and Ishii, K. *Progress of Teoretical Physics* **45**, 56 (1970).
- [81] Ziman, T. A. L. *Physical Review Letters* **49**, 337 (1982).
- [82] Theodorou, G. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **15**, L1315 (1982).

- [83] Evangelou, S. and Katsanos, D. *Physics Letters A* **164**, 456 (1992).
- [84] Evangelou, S. N., Wang, A. Z., and Xiong, S. J. *Journal of Physics: Condensed Matter* **6**, 4937 (1994).
- [85] Azbel, M. Y. *Physical Review Letters* **43**, 1954 (1979).
- [86] Sokoloff, J. B. *Physical Review B* **22**, 5823 (1980).
- [87] Soukoulis, C. M. and Economou, E. N. *Physical Review Letters* **48**, 1043 (1982).
- [88] Grepel, D. R., Fishman, S., and Prange, R. E. *Physical Review Letters* **49**, 833 (1982).
- [89] Griniasty, M. and Fishman, S. *Physical Review Letters* **60**, 1334 (1988).
- [90] Sarma, S. D., He, S., and Xie, X. C. *Physical Review Letters* **61**, 2144 (1988).
- [91] Thouless, D. J. *Physical Review Letters* **61**, 2141 (1988).
- [92] Sarma, S. D., He, S., and Xie, X. C. *Physical Review B* **41**, 5544 (1990).
- [93] Costa, A. E. and de Moura, F. A. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* **79**, 253 (2011).
- [94] Cai, X., Chen, S., and Wang, Y. *Physical Review A* **81**, 023626 (2010).
- [95] Nascimento, E., de Moura, F., and Lyra, M. *Photonics and Nanostructures â Fundamentals and Applications* **7**, 101 (2009).
- [96] de Moura, F. *The European Physical Journal B* **58**, 389 (2007).
- [97] Flores, J. C. *Journal of Physics: Condensed Matter* **1**, 8471 (1989).
- [98] Dunlap, D. H., Wu, H.-L., and Phillips, P. W. *Physical Review Letters* **65**, 88 (1990).
- [99] Bovier, A. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **25**, 1021 (1992).
- [100] Wu, H.-L. and Phillips, P. *Physical Review Letters* **66**, 1366 (1991).
- [101] Sánchez, A., Maciá, E., and Domínguez-Adame, F. *Physical Review B* **49**, 147 (1994).
- [102] Bellani, V., Diez, E., Hey, R., Toni, L., Tarricone, L., Parravicini, G. B., Domínguez-Adame, F., and Gómez-Alcalá, R. *Physical Review Letters* **82**, 2159 (1999).
- [103] Bellani, V., Diez, E., Parisini, A., Tarricone, L., Hey, R., Parravicini, G. B., and Domínguez-Adame, F. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **7**, 823 (2000).
- [104] de Moura, F. A. B. F. and Lyra, M. L. *Physical Review Letters* **81**, 3735 (1998).

- [105] Izrailev, F. M. and Krokhin, A. A. *Physical Review Letters* **4062**, 82 (1999).
- [106] Kuhl, U., Izrailev, F. M., Krokhin, A. A., and Stöckmann, H.-J. *Applied Physics Letters* **77**, 633 (2000).
- [107] Kuhl, U. and Stöckmann, H.-J. *Physical Review Letters* **80**, 3232 (1998).
- [108] Carpena, P., Bernaola-Galván, P., Ivanov, P. C., and Stanley, H. E. *Nature* **418**, 955–959 (2002).
- [109] Costa, A. E. B. and de Moura, F. A. B. F. *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 065101 (2011).
- [110] Dias, W., de Moura, F., Coutinho-Filho, M., and Lyra, M. *Physics Letters A* **374**, 3572 (2010).
- [111] Hubbard, J. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **276**, 238 (1963).
- [112] Hubbard, J. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **277**, 237 (1964).
- [113] Hubbard, J. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **281**, 401 (1964).
- [114] Yamada, K. *Electron Correlation in Metals*. Cambridge University Press, (2004).
- [115] Yanase, Y., Jujo, T., Nomura, T., Ikeda, H., Hott, T., and Yamada, K. *Physics Reports* **387**, 149 (2003).
- [116] Jaksch, D., Bruder, C., Cirac, J. I., Gardiner, C. W., and Zoller, P. *Physical Review Letters* **81**, 3108 (1998).
- [117] Greiner, M., Mandel, O., Hänsch, T. W., and Bloch, I. *Nature* **419**, 51 (2002).
- [118] Stöferle, T., Moritz, H., Schori, C., Köhl, M., and Esslinger, T. *Physical Review Letters* **92**, 130403 (2004).
- [119] Müller-Groeling, A., Weidenmüller, H. A., and Lewenkopf, C. H. *Europhysics Letters* **22**, 193 (1993).
- [120] Abraham, M. and Berkovits, R. *Physical Review Letters* **70**, 1509 (1993).
- [121] Bouzerar, G., Poilblanc, D., and Montambaux, G. *Physical Review B* **49**, 8258 (1994).
- [122] Lévy, L. P., Dolan, G., Dunsmuir, J., and Bouchiat, H. *Physical Review Letters* **64**, 2074 (1990).
- [123] Weinmann, D., Müller-Groeling, A., Pichard, J.-L., and Frahm, K. *Physical Review Letters* **75**, 1598 (1995).

- [124] Frahm, K., Müller-Groeling, A., and Pichard, J.-L. *Physical Review Letters* **76**, 1509 (1996).
- [125] Imry, Y. *Europhysics Letters* **30**, 405 (1995).
- [126] Frahm, K., Müller-Groeling, A., Pichard, J.-L., and Weinmann, D. *Europhysics Letters* **31**, 169 (1995).
- [127] von Oppen, F., Wettig, T., and Müller, J. *Physical Review Letters* **76**, 491 (1996).
- [128] Weinmann, D. and Pichard, J.-L. *Physical Review Letters* **77**, 1556 (1996).
- [129] Song, P. H. and Kim, D. *Physical Review B* **56**, 12217 (1997).
- [130] de Brito, P. E., Rodrigues, E. S., and Nazareno, H. N. *Physical Review B* **73**, 014301 (2006).
- [131] Vidal, J., Douçot, B., Mosseri, R., and Butaud, P. *Physical Review Letters* **85**, 3906 (2000).
- [132] Gambetti-Césaire, E., Weinmann, D., Jalabert, R. A., and Brune, P. *Europhysics Letters* **60**, 120 (2002).
- [133] Waintal, X., Benenti, G., and Pichard, J.-L. *Europhysics Letters* **49**, 466 (2000).
- [134] Byczuk, K., Hofstetter, W., and Vollhardt, D. *Physical Review Letters* **94**, 056404 (2005).
- [135] Pezzoli, M. E. and Becca, F. *Physical Review B* **81**, 075106 (2010).
- [136] Dias, W., Nascimento, E., de Moura, F., and Lyra, M. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **321**, 2304 (2009).
- [137] Weiss, P. *Journal de Physique* **6**, 661 (1907).
- [138] Heisenberg, W. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **38**, 441 (1926).
- [139] Heisenberg, W. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **49**, 619 (1928).
- [140] Dirac, P. A. M. *Proceedings of the Royal Society A* **112**, 661 (1926).
- [141] Dirac, P. A. M. *Proceedings of the Royal Society A* **123**, 714 (1929).
- [142] Bloch, F. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **61**, 206 (1930).
- [143] Kranendonk, J. V. and Vleck, J. H. V. *Reviews of Modern Physics* **30**, 1 (1958).
- [144] Herring, C. and Kittel, C. *Physical Review* **81**, 869 (1951).
- [145] Kittel, C. *Physical Review* **110**, 836 (1958).
- [146] Berger, L. *Physical Review B* **54**, 9353 (1996).

- [147] Manousakis, E. *Reviews of Modern Physics* **63**, 1 (1991).
- [148] Kubo, R. *Reviews of Modern Physics* **25**, 344 (1953).
- [149] Cieplak, M. and Ismail, G. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **20**, 1309 (1987).
- [150] Riklund, R. and Severin, M. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **21**, L965 (1988).
- [151] de Moura, F. A. B. F., Coutinho-Filho, M. D., Raposo, E. P., and Lyra, M. L. *Physical Review B* **66**, 014418 (2002).
- [152] Kozhanov, A., Ouellette, D., Rodwell, M., Allen, S. J., Jacob, A. P., Lee, D. W., and Wang, S. X. *Journal of Applied Physics* **105**, 07D311 (2009).
- [153] Madami, M., Tacchi, S., Gubbiotti, G., Bonanni, V., Bisero, D., Vavassori, P., Adeyeye, A. O., Goolaup, S., Singh, N., and Spezzani, C. *Journal of Applied Physics* **105**, 07C115 (2009).
- [154] Balhorn, F., Mansfeld, S., Krohn, A., Topp, J., Hansen, W., Heitmann, D., and Mendach, S. *Physical Review Letters* **104**, 037205 (2010).
- [155] Khitun, A., Nikonov, D. E., and Wang, K. L. *Journal of Applied Physics* **106**, 123909 (2009).
- [156] Khitun, A., Bao, M., and Wang, K. L. *Journal of Physics D: Applied Physics* **43**, 264005 (2010).
- [157] Kim, S.-K. *Journal of Physics D: Applied Physics* **43**, 264004 (2010).
- [158] Bethe, H. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **71**, 205 (1931).
- [159] Holstein, T. and Primakoff, H. *Physical Review* **58**, 1098 (1940).
- [160] Dyson, F. J. *Physical Review* **102**, 1217 (1956).
- [161] Wortis, M. *Physical Review* **132**, 85 (1963).
- [162] Nascimento, E. M., de Moura, F. A. B. F., and Lyra, M. L. *Physical Review B* **72**, 224420 (2005).
- [163] H., W., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., and Vetterling, W. T. *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, (1999).
- [164] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Blackford, S., Demmel, J., Dongarra, J., Croz, J. D., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., and Sorensen, D. *Lapack users'guide*. Society for Industrial and Applied Mathematic, (1999).
- [165] Paczuski, M., Maslov, S., and Bak, P. *Physical Review E* **53**, 414 (1996).

- [166] Wegner, F. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **36**, 209 (1980).
- [167] Dias, W., Lyra, M., and de Moura, F. *Physics Letters A* **374**, 4554 (2010).
- [168] Dias, W. S., Nascimento, E. M., Lyra, M. L., and de Moura, F. A. B. F. *Physical Review B* **81**, 045116 (2010).
- [169] Evangelou, S. N., Xiong, S.-J., and Economou, E. N. *Physical Review B* **54**, 8469 (1996).
- [170] Evangelou, S. N. and Katsanos, D. E. *Physical Review B* **56**, 12797 (1997).
- [171] Gong, L. and Tong, P. *Physical Review B* **76**, 085121 (2007).
- [172] de Brito, P., Rodriguesa, E., and Nazareno, H. *Physica B: Condensed Matter* **388**, 393 (2007).
- [173] Römer, R. A. and Schreiber, M. *Physical Review Letters* **78**, 515 (1997).
- [174] Dias, W. S., Nascimento, E. M., Lyra, M. L., and de Moura, F. A. B. F. *Physical Review B* **76**, 155124 (2007).
- [175] Souza, D. and Claro, F. *Physical Review B* **82**, 205437 (2010).
- [176] Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D. *Solid State Physics*. Thomson Learning, (1976).
- [177] Wannier, G. H. *Physical Review* **100**, 1227 (1955).
- [178] Wannier, G. H. *Physical Review* **117**, 432 (1960).
- [179] Wannier, G. H. *Physical Review* **101**, 1835 (1956).
- [180] Wannier, G. H. *Reviews of Modern Physics* **34**, 645 (1962).
- [181] de Toledo Piza, A. F. R. *Mecânica Quântica*. Editora da Universidade de São Paulo, (2003).
- [182] Lopes, J. *A Estrutura Quântica da Matéria*. EDITORA UFRJ, (1993).
- [183] Feldmann, J., Leo, K., Shah, J., Miller, D. A. B., Cunningham, J. E., Meier, T., von Plessen, G., Schulze, A., Thomas, P., and Schmitt-Rink, S. *Physical Review B* **46**, 7252 (1992).
- [184] Leo, K., Bolivar, P. H., Brüggemann, F., Schwedler, R., and Köhler, K. *Solid State Communications* **84**, 943 (1992).
- [185] Waschke, C., Roskos, H. G., Schwedler, R., Leo, K., and Köhler, H. K. K. *Physical Review Letters* **70**, 3319 (1993).
- [186] Dekorsy, T., Leisching, P., Köhler, K., and Kurz, H. *Physical Review B* **50**, 8106 (1994).

- [187] Lyssenko, V. G., Valusis, G., Löser, F., Hasche, T., Leo, K., Dignam, M. M., and Köhler, K. *Physical Review Letters* **79**, 301 (1997).
- [188] Dahan, M. B., Peik, E., Reichel, J., Castin, Y., and Salomon, C. *Physical Review Letters* **76**, 4508 (1996).
- [189] Wilkinson, S. R., Bharucha, C. F., Madison, K. W., Niu, Q., and Raizen, M. G. *Physical Review Letters* **76**, 4512 (1996).
- [190] Morsch, O., Müller, J. H., Cristiani, M., Ciampini, D., and Arimondo, E. *Physical Review Letters* **87**, 140402 (2001).
- [191] Gustavsson, M., Haller, E., Mark, M. J., Danzl, J. G., Rojas-Kopeinig, G., and Nägerl, H.-C. *Physical Review Letters* **100**, 080404 (2008).
- [192] Fattori, M., DâErrico, C., Roati, G., Zaccanti, M., Jona-Lasinio, M., Modugno, M., Inguscio, M., and Modugno, G. *Physical Review Letters* **100**, 080405 (2008).
- [193] da Silva, C. A. A., de Brito, P. E., and Nazareno, H. N. *Physical Review B* **52**, 7775 (1995).
- [194] Nazareno, H. N., de Brito, P. E., and da Silva, C. A. A. *Physical Review B* **51**, 864 (1995).
- [195] Diez, E., Domínguez-Adame, F., and Sánchez, A. *Microelectronic Engineering* **43**, 117 (1998).
- [196] Walter, S., Schneble, D., and Durst, A. C. *Physical Review A* **81**, 033623 (2010).
- [197] Drenkelforth, S., Büning, G. K., Will, J., Schulte, T., Murray, N., Ertmer, W., Santos, L., and Arlt, J. J. *New Journal of Physics* **10**, 045027 (2008).
- [198] Domínguez-Adame, F., Malyshev, V. A., de Moura, F. A. B. F., and Lyra, M. L. *Physical Review Letters* **91**, 197402 (2003).
- [199] de Moura, F. A. B. F., Lyra, M. L., Domínguez-Adame, F., and Malyshev, V. A. *Physical Review B* **71**, 104303 (2005).
- [200] de Moura, F. A. B. F., Lyra, M. L., Domínguez-Adame, F., and Malyshev, V. *Journal of Physics: Condensed Matter* **19**, 056204 (2007).
- [201] Freericks, J. K., Turkowski, V. M., and Zlatić, V. *Physical Review Letters* **97**, 266408 (2006).
- [202] Buchleitner, A. and Kolovsky, A. R. *Physical Review Letters* **91**, 253002 (2003).
- [203] Gaul, C., Lima, R. P. A., Müller, E. D. C. A., and Domínguez-Adame, F. *Physical Review Letters* **102**, 255303 (2009).
- [204] Weisz, J. F. and Claro, F. *Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, 3213 (2003).

- [205] Claro, F., Weisz, J. F., and Curilef, S. *Physical Review B* **67**, 193101 (2003).
- [206] Shukla, P. *Journal of Physics: Condensed Matter* **17**, 1653 (2005).
- [207] Djeraba, A., Senoucia, K., and Zekria, N. *Physica B: Condensed Matter* **405**, 1558 (2010).
- [208] Lima, R. P. A., da Cruz, H. R., Cressoni, J. C., and Lyra, M. L. *Physical Review B* **69**, 165117 (2004).
- [209] Mehta, M. L. *Random Matrices*. Elsevier, (2004).
- [210] Evangelou, S. N. and Katsanos, D. E. *Journal of Statistical Physics* **85**, 525 (1996).
- [211] Dias, W. S., Lyra, M. L., and de Moura, F. A. B. F. *Physical Review B* **82**, 233102 (2010).
- [212] de Moura, F., Gléria, I., dos Santos, I. F., and Lyra, M. L. *Physical Review Letters* **103**, 096401 (2009).
- [213] de Moura, F. A. B. F., Vidal, E. J. G. G., Gléria, I., and Lyra, M. L. *Physics Letters A* **374**, 4152 (2010).
- [214] Wang, B. B., Fu, P. M., Liu, J., and Wu, B. *Physical Review A* **74**, 063610 (2008).
- [215] Xue, J. K. and Zhang, A. X. *Physical Review Letters* **101**, 180401 (2008).
- [216] Akhmediev, N., Ankiewicz, A., and Soto-Crespo, J. M. *Physical Review E* **80**, 026601 (2009).
- [217] Ponomarenko, S. A. and Agrawal, G. P. *Physical Review Letters* **97**, 013901 (2006).
- [218] Lahini, Y., Avidan, A., Pozzi, F., Sorel, M., Morandotti, R., Christodoulides, D. N., and Silberberg, Y. *Physical Review Letters* **100**, 013906 (2008).
- [219] Anker, T., Albiez, M., Gati, R., Hunsmann, S., B. Eiermann, A. T., and Oberthaler, M. K. *Physical Review Letters* **94**, 020403 (2005).
- [220] Shepelyansky, D. L. *Physical Review Letters* **70**, 1787 (1993).
- [221] Molina, M. I. *Physical Review B* **58**, 12547 (1998).
- [222] Kottos, T. and Weiss, M. *Physical Review Letters* **93**, 190604 (2004).
- [223] Aubry, S. *Physica D* **103**, 201 (1997).
- [224] Mackay, R. S. and Aubry, S. *Nonlinearity* **7**, 1623 (1994).
- [225] Trombettoni, A. and Smerzi, A. *Physical Review Letters* **86**, 2353 (2001).
- [226] Abdullaev, F. K. *Physical Review A* **64**, 43606 (2001).

- [227] Fleischer, J. W., Carmon, T., Segev, M., Efremidis, N. K., and Christodoulides, D. N. *Physical Review Letters* **90**, 023902 (2003).
- [228] Efremidis, N. K. and Hizanidis, K. *Physical Review Letters* **101**, 143903 (2008).
- [229] Hatch, R. C., Huber, D. L., and Häflichst, H. *Physical Review Letters* **104**, 047601 (2010).
- [230] Bianchi, M., Rienks, E. D. L., Lizzit, S., Baraldi, A., Balog, R., Hornekaer, L., and Hofmann, P. *Physical Review B* **81**, 041403 (2010).
- [231] Grüneis, A., Attaccalite, C., A. Rubio, D. V. V., Molodtsov, S. L., Fink, J., Follath, R., Eberhardt, W., Büchner, B., and Pichler, T. *Physical Review B* **79**, 205106 (2009).
- [232] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., and Firsov, A. A. *Science* **306**, 666 (2004).
- [233] Wallace, P. R. *Physical Review* **71**, 622 (1947).
- [234] McClure, J. W. *Physical Review* **104**, 666 (1956).
- [235] R. Saito, G. D. and Dresselhaus, M. S. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, (1998).
- [236] Mermin, N. D. *Physical Review* **176**, 250 (1968).
- [237] H., C. N. A., F., G., R., P. N. M., S., N. K., and K., G. A. *Reviews of Modern Physics* **81**, 109 (2009).
- [238] Xu, Z., Zheng, Q.-S., and Chen, G. *Applied Physics Letters* **90**, 223115 (2007).
- [239] Wang, Z. F., Shi, Q. W., Li, Q., Wang, X., Hou, J. G., Zheng, H., Yao, Y., and Chen, J. *Applied Physics Letters* **91**, 053109 (2007).
- [240] Yan, Q., Huang, B., Yu, J., Zheng, F., Zang, J., Wu, J., Gu, B.-L., Liu, F., and Duan, W. *Nano Letters* **7**, 1469 (2007).
- [241] Kevrekidis, P. G., Malomed, B. A., and Gaididei, Y. B. *Physical Review E* **66**, 016609 (2002).
- [242] Pikovsky, A. and Shepelyansky, D. *Physical Review Letters* **100**, 094101 (2008).
- [243] García-Mata, I. and Shepelyansky, D. *Physical Review E* **79**, 026205 (2009).
- [244] Iomin, A. *Physical Review E* **81**, 017601 (2010).
- [245] Tietsche, S. and Pikovsky, A. *Europhysics Letters* **84**, 10006 (2008).

Dedução do Teorema de Bloch

O modelo estudado por Bloch se refere a um elétron sujeito a um potencial periódico. Estas considerações fazem com que a função de onda eletrônica deva satisfazer a equação de Schrödinger

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi \quad (\text{A.1})$$

Uma vez que o potencial da rede é periódico, temos

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \quad (\text{A.2})$$

sendo \mathbf{a} um vetor da rede Bravais. Cada vetor \mathbf{a} da rede pode ser visto como uma *translação no espaço que deixa a rede invariante*, denominada translação de rede.

Para cada vetor da rede de Bravais \mathbf{a} associamos um operador translação $T_{\mathbf{a}}$ que, ao operar sobre qualquer função $f(\mathbf{r})$, desloca o seu argumento por \mathbf{a}

$$T_{\mathbf{a}}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \quad (\text{A.3})$$

Em função da periodicidade da rede, o Hamiltoniano A.1 permanece a mesma ao substituímos \mathbf{r} por $\mathbf{r} + \mathbf{a}$ nos operadores que agem sobre ψ . Desta forma

$$T_{\mathbf{a}}H\psi = H(\mathbf{r} + \mathbf{a})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = HT_{\mathbf{a}}\psi \quad (\text{A.4})$$

Temos então

$$T_{\mathbf{a}}H = HT_{\mathbf{a}} \quad (\text{A.5})$$

Uma vez que o resultado de duas translações sucessivas não dependem da ordem em que são aplicadas, pois

$$T_{\mathbf{a}}T_{\mathbf{a}'}\psi(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{a}'}T_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a} + \mathbf{a}'), \quad (\text{A.6})$$

temos

$$T_{\mathbf{a}}T_{\mathbf{a}'} = T_{\mathbf{a}'}T_{\mathbf{a}} = T_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'} \quad (\text{A.7})$$

Podemos ver que as equações A.5 e A.7 nos permite escolher autofunções de energia que sejam também autofunções de qualquer operador de translação:

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.8})$$

$$T_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = t_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.9})$$

Diante disto, vemos que os autovalores de translação $t_{\mathbf{a}}$ devem satisfazer a equação A.7 por um lado

$$T_{\mathbf{a}'}T_{\mathbf{a}}\psi = t_{\mathbf{a}}T_{\mathbf{a}'}\psi = t_{\mathbf{a}}t_{\mathbf{a}'}\psi, \quad (\text{A.10})$$

e também pelo outro

$$T_{\mathbf{a}'}T_{\mathbf{a}}\psi = T_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}\psi = t_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}\psi \quad (\text{A.11})$$

Assim a equação de autovalores deve satisfazer

$$t_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'} = t_{\mathbf{a}}t_{\mathbf{a}'} \quad (\text{A.12})$$

onde podemos escolher

$$t_{\mathbf{a}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} \quad (\text{A.13})$$

Em resumo, podemos mostrar que os autoestados de H podem ser escritos na forma

$$T_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = t_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.14})$$

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.15})$$

Esta equação é conhecida como o Teorema de Bloch.

Expansão de Taylor do operador evolução temporal

Considere um hamiltoniano, por exemplo, o hamiltoniano de Anderson

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} T_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (\text{B.1})$$

onde ϵ_i é a energia do elétron no sítio i e T_{ij} é o termo de hopping responsável pelo movimento do elétron do sítio i para o sítio j . A equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = H|\Psi\rangle \quad (\text{B.2})$$

pode ser resolvida encontrando-se

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\Psi_0(t=t_0)\rangle \quad (\text{B.3})$$

onde

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i C_i(t) |i\rangle \quad (\text{B.4})$$

$C_i(t)$ é a amplitude de probabilidade do elétron estar na posição i no tempo t . Desta forma, a função de onda no instante inicial ($t=0$) é

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_i C_i(0) |i\rangle \quad (\text{B.5})$$

Isto nos permite escrever a equação de Schrödinger (equação B.2) como

$$\sum_i C_i(dt) |i\rangle = e^{-\frac{iHdt}{\hbar}} \sum_i C_i(0) |i\rangle \quad (\text{B.6})$$

Podemos, nesta última expressão, expandir a exponencial em série de Taylor

$$e^{-\frac{iHdt}{\hbar}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n \quad (\text{B.7})$$

de maneira que

$$\sum_i C_i(dt)|i\rangle = \sum_i C_i(0)|i\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_i \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n C_i(0)|i\rangle \quad (\text{B.8})$$

Vemos, desta forma, que a função de onda num tempo Δt é dado por

$$|\Psi(dt)\rangle = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHdt}{\hbar} \right)^n \right] |\Psi(t=0)\rangle \quad (\text{B.9})$$

Aplicando este método recursivamente, é possível obter a função de onda num tempo t .

Anexo **A**

Artigo: Transição tipo Kosterlitz-Thouless
em redes 2d



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Physics Letters A

www.elsevier.com/locate/pla



Kosterlitz–Thouless-like transition in two-dimensional lattices with long-range correlated hopping terms

W.S. Dias^a, F.A.B.F. de Moura^{a,*}, M.D. Coutinho-Filho^b, M.L. Lyra^a

^a Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

^b Laboratório de Física Teórica e Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE 50670-901, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 16 June 2010
 Received in revised form 28 June 2010
 Accepted 29 June 2010
 Available online 9 July 2010
 Communicated by V.M. Agranovich

Keywords:

Anderson transition
 Localization
 Electrons
 Transport
 Correlated
 Disorder

ABSTRACT

We study the Anderson localization in two-dimensional lattices with long-range correlated hopping terms. The hopping energies along one lattice direction will be generated by a superposition of uncorrelated and long-range correlated contributions. Our numerical results strongly suggest the presence of a Kosterlitz–Thouless-like transition above a critical correlation degree.

© 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Materials with restricted geometry, such as semiconductor quantum-well structures [1], quantum dots and wires [2,3], organic thin films [4], quasiperiodic [5] as well as more general aperiodic structures [6] are nowadays objects of growing interest from both fundamental and practical point of views. An attributive peculiarity of almost all of them is the presence of disorder, which can be of an intrinsic nature (imperfections of the structure itself) as well as originated from a random environment.

Whenever disorder is involved, Anderson's ideas about localization of quasiparticle states come into play [7]. In three dimensions, the states at the center of the quasiparticle energy band remain extended for a relatively weak disorder (of magnitude smaller than the bandwidth), while the other states (in the neighborhood of the band edges) turn out to be exponentially localized. This implies the existence of two mobility edges which separates the phases of extended and localized states [8]. On the contrary, uncorrelated disorder of any magnitude causes localization of all one-particle eigenstates in one dimension (1D) [9] and two dimensions (2D) [10]. However, it was suggested that low-dimensional Anderson models with purely off-diagonal disorder might violate this general statement since a singularity of the density of states (DOS)

was found at the band center [11–14]. A thorough analysis of the singularity of the DOS in the 1D Anderson model with off-diagonal disorder and nearest-neighbor interactions showed that the states belonging to this singularity are localized with no tendency of delocalization with increasing chain size [13]. On the other hand, the states belonging to the DOS singularity of the 2D counterpart model display a power-law divergence with the system size, a typical behavior of critical states [14].

Since late eighties, however, it has been realized that extended states may survive on 1D systems if the disorder distribution is correlated [15–23]. Short-range correlated disorder was found to support extended states at special resonance energies. In the thermodynamic limit, such extended states form a set of null measure in the density of states [15–19], implying the absence of mobility edges in these systems. In contrast, systems with long-range correlations in the disorder distribution support a finite fraction of delocalized states [21,22], giving rise to mobility edges. Theoretical predictions of localization suppression on 1D geometries, due to correlations of the disorder distribution, were confirmed experimentally in semiconductor superlattices with intentional correlated disorder [20], as well as in single-mode wave guides with correlated scatterers [23].

A first study of the effects of long-range correlations in the localization properties of $2d$ electronic systems with orthogonal symmetry was performed in Ref. [24]. The authors considered a striped media in the x - y plane with on-site disorder. The on-site energies were generated by a superposition of an uncorre-

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

lated term and a long-range correlated contribution along the y -direction. It was predicted that this system displays a disorder-driven Kosterlitz–Thouless-like MIT in the regime of strong correlations. More recently, the effects of long-range correlations in both x - and y -directions, were studied [25–28]. A transfer matrix numerical calculation on a striped geometry, combined with finite-size scaling arguments, confirmed the presence of a correlation induced Kosterlitz–Thouless transition [25]. In addition, by considering the site energies of the $2d$ Anderson Hamiltonian distributed in such a way to have a power-law spectral density $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2d}}$, an exact diagonalization formalism of finite lattices with a square geometry showed that this model displays a phase of low-energy extended states for $\alpha_{2d} > 2$. In this regime, the dynamics associated with the spread of an initially localized wave packet becomes ballistic [26]. Moreover, the exponents governing the collapse of the participation function for low energies ($\xi \propto L^{D_2}$) and the long time decay of the autocorrelation function [$C(t) \propto t^{-\beta}$] were shown to satisfy the scaling relation $D_2 = \beta d$. Furthermore, the scale invariance of the participation function relative fluctuation at the critical point was investigated in Ref. [27]. By using a finite size scaling hypothesis it was shown that the correlation length critical exponent depends on α_{2d} , thus indicating that correlations in the disorder distribution are indeed relevant in this regime, in agreement with the extended Harris criterion.

While the delocalization phenomenon induced by long-range correlations in the on-site potential has been extensively investigated in the literature, the counterpart model with long-range correlated off-diagonal disorder is still quite unexplored. In this work, we report further progress along this direction. We will develop transfer matrix calculations on the $2d$ Anderson model with long range correlated hopping terms. Here, we will consider a striped geometry in the x - y plane with zero on-site potentials. The hopping energies along the y -direction will be generated by a superposition of an uncorrelated term and a long-range correlated one. Combining the transfer matrix calculations with finite-size scaling arguments, we compute the localization length in the thermodynamic limit. We will show that the scaling behavior is compatible with the presence of a Kosterlitz–Thouless metal–insulator transition [25].

2. Model and formalism

We consider the $2d$ Anderson Hamiltonian with disordered hopping terms and null on-site energies ($\epsilon_{im} = 0$) on a striped square lattice geometry $L \times M$ [24,25]:

$$H = \sum_{\langle x_1 y_1, x_2 y_2 \rangle} T_{x_1 y_1, x_2 y_2} (|x_1, y_1\rangle \langle x_2, y_2|), \quad (1)$$

where $|x, y\rangle$ is a Wannier state localized at site (x, y) and $\sum_{\langle x_1 y_1, x_2 y_2 \rangle}$ represents a sum over nearest-neighbor pairs. The matrix $T_{x_1 y_1, x_2 y_2}$ contains the hopping terms along both x - and y -directions. In our calculations, we fix the hopping term along the x -direction by $t_x = 1$. The hopping terms along the y -direction will be generated by a superposition of an uncorrelated contribution and a long-range correlated term,

$$t_y = \tanh(v_y + \rho_y) + \langle t_y \rangle. \quad (2)$$

The first term v_y represents a long-range correlated sequence defined by

$$v_y = \zeta(\alpha) \sum_{k=1}^{L/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos\left(\frac{2\pi ky}{L} + \phi_k\right) \quad (3)$$

where ϕ_k are $L/2$ (L even) independent random phases uniformly distributed in the interval $[0, 2\pi]$ and $\zeta(\alpha)$ is a normalization constant which is chosen to have the sequence variance

$\sigma = \sqrt{\langle v_y^2 \rangle - \langle v_y \rangle^2} = 1$. We also shift the sequence in order to have $\langle v_y \rangle = 0$. Typically, this sequence is the trace of a $1d$ fractional Brownian motion with a well defined power-law spectrum $S(k) \propto 1/k^\alpha$. The second term ρ_y describes L independent random numbers uniformly distributed in the interval $[-W/2, W/2]$. Here we use $\langle t_y \rangle = 2$ to avoid negative hopping terms.

In order to calculate the typical localization length of electrons, we use the finite size scaling method combined with the transfer-matrix technique [24]. We calculate the damping of wave functions in the y -direction for a long strip of size $L \times M$ with L being extremely large ($L \approx 2 \times 10^6$). The periodic boundary condition is adopted in the x -direction. For a given energy E , a $2M \times 2M$ transfer matrix Q_n can be easily set up, mapping the wave-function amplitudes at column $n+1$ to those at column n in the strip. The propagation along the strip is therefore described by the product of transfer matrices

$$P_L = Q_{L-1} Q_{L-2} \cdots Q_2 Q_1. \quad (4)$$

The transfer matrix P_L has M pairs of eigenvalues whose logarithms correspond to the Lyapunov exponents [24,25]. The largest localization length $\lambda(E)$ for a given energy E in a system with a finite width M is given by the inverse of the smallest Lyapunov exponent. In our numerical calculation, we choose L about 2×10^6 so that the self-averaging effect automatically takes care of statistical fluctuations. We estimate and control these fluctuations following the deviations of the calculated eigenvalues of two adjacent iterations. The finally obtained data have statistical errors less than the symbol size in the corresponding figures. We use the standard one-parameter finite-size scaling ansatz [24,25] to obtain the thermodynamic localization length λ_∞ . According to the one-parameter scaling theory, the rescaled localization length $\Lambda = \lambda(E)/M$ can be expressed near the critical point in terms of a universal function given by:

$$\Lambda = f(\lambda_\infty/M). \quad (5)$$

We also study some dynamical aspects by examining the time evolution of an initially localized wave packet on a $L \times L$ square lattice. The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent Schrödinger equation as ($\hbar = 1$) [26]

$$i \frac{dc_{x,y}(t)}{dt} = t_{y-1} c_{x,y-1}(t) + t_y c_{x,y+1}(t) + c_{x-1,y}(t) + c_{x+1,y}(t), \quad (6)$$

$x, y = 1, 2, \dots, L.$

We consider a wave packet initially localized at site $x_0 = L/2, y_0 = L/2$, i.e. $c_{x,y}(t=0) = \delta_{x,x_0} \delta_{y,y_0}$. The above set of equations were solved numerically by using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator $V(\Delta t)$:

$$V(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!} \quad (7)$$

where H is the Hamiltonian. The wave-function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. The method can be used recursively to obtain the wave-function at time t . The following results were taken by using $\Delta t = 0.05$ and the sum was truncated at $n_0 = 20$. This cutoff was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered. We are particularly interested in calculating the wave packet mean-square displacement $\xi(t)$ along the y -direction (the correlated direction) [26]

$$\xi(t) = \sqrt{\sum_{x=1}^L \sum_{y=1}^L [(y - y_0)^2] |c_{x,y}(t)|^2}. \quad (8)$$

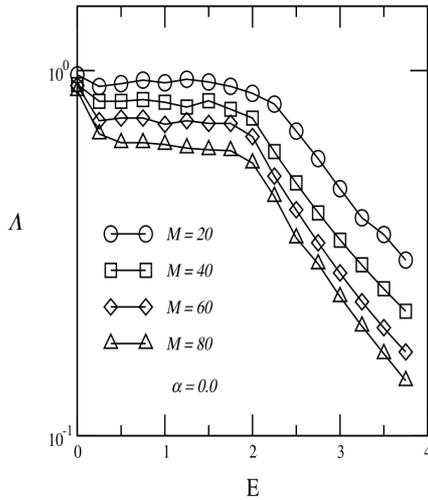


Fig. 1. Rescaled localization length $\lambda(E)/M$ as a function of energy E for $\alpha = 0$ and $M = 20$ up to 80. The curves for smaller M are always above those of larger M throughout the entire range of energies. This feature indicates that there is no mobility edge.

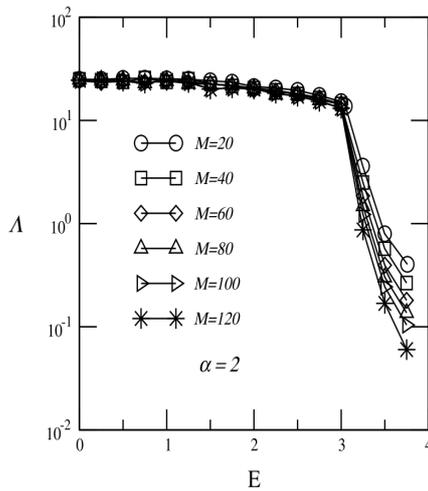


Fig. 2. Rescaled localization length $\Lambda = \lambda(E)/M$ as a function of energy E for $\alpha = 2$ and $M = 20$ up to 120. We can see that all curves merge together for $E < E_c \approx 3$. This behavior signals a metal-insulator transition at $E = E_c$.

3. Results and discussion

All transfer matrix calculations were done for $L \approx 2 \times 10^6$ and $W = 1$. Fig. 1 presents the rescaled localization length $\Lambda = \lambda(E)/M$ as a function of energy E for $\alpha = 0$. The curves of the smaller M are always above those of larger M throughout the entire range of energies, thus indicating that there is no mobility edge and, correspondingly, no metal-insulator transition. In Fig. 2 we show similar data taken from the case of strongly correlated off-diagonal disorder ($\alpha = 2$). This picture has a qualitatively different feature: all curves merge together for $E < E_c \approx 3$. This signals a delocalization phase transition at $E = E_c$. In Fig. 3, we plot the rescaled localization length $\Lambda = \lambda(E)/M$ for a specific energy below E_c ($E = 1$) as a function of M . We can see that the phase transition occurs at $\alpha > 1$, with the rescaled localization length becoming size independent in the regime of large M . In Fig. 4(a) we collect results for the localization length extrapolated to the thermodynamical limit. These estimated values were obtained from the scaling ansatz close to the critical energy $E_c \approx 3$. We successfully

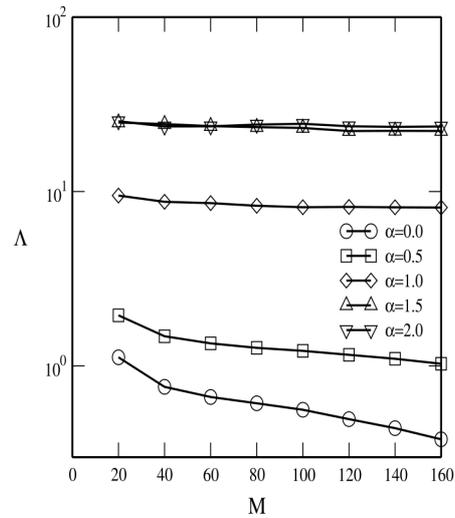


Fig. 3. Rescaled localization length $\Lambda = \lambda(E)/M$ for a specific energy below E_c ($E = 1$) as a function of M . We can see that the phase transition occurs for $\alpha > 1$, characterized by the size independence of the asymptotic scaled localization length.

fit the data with $\lambda_\infty \propto \exp(C/\sqrt{E - E_c})$ with $E_c = 3.00(5)$ indicating a fast decay of the localization length on the insulating side by increasing the deviation from the transition point. This behavior is the typical one for a disorder driven Kosterlitz-Thouless-like transition (KT transition). Using the estimated extrapolated localization lengths, we report in Fig. 4(b) the data for the scaled localization length $\lambda(E)/M$ close to critical energy $E_c = 3.00(5)$ as a function of the proper scaling variable $\lambda_\infty(E)/M$. We have used energy values from $E = 3.20$ up to 3.55 with $\Delta E = 0.05$ and stripe sizes ranging from $M = 20$ up to 120. The fact that all data from distinct energies and system sizes fall into a single curve, without the need of any additional adjusting parameter, reflects the accuracy of the estimated extrapolated localization length and the absence of significant corrections to scaling in the asymptotic regime investigated.

Finally, we show in Fig. 5 results for the time evolution of an initially localized wave-packet in a square lattice with 3000×3000 sites and $\alpha = 0, 1.5$ and 3. Numerical convergence was ensured by conservation of the norm of the wave-packet at every time step, i.e., $1 - \sum_n |c_n(t \rightarrow \infty)|^2 \approx 10^{-15}$. The extended states that appear in this model emerge in the regime at which the potential has a strong correlation degree. These are typically non scattered modes thus leading to a ballistic wave-packet spread, $\xi(t) \propto t$. In Fig. 5 we obtain roughly a ballistic spread for $\alpha > 1$. In the long-time, $\xi(t)$ displays a saturation that represents the package arrival at the lattice boundaries.

4. Summary and concluding remarks

In this Letter, we studied the localization properties in 2D striped media with off-diagonal long-range-correlated disorder. The hopping energies along the y -direction were assumed to be composed of a superposition of an uncorrelated disorder term and a long-range correlated random contribution. The long-range correlated terms were distributed in such a way to have a power-law spectral density $S(k) \propto k^{-\alpha}$. By using the well-developed transfer-matrix method we find that the system undergoes a unconventional correlation-driven Kosterlitz-Thouless metal-insulator transition when the hopping disorder distribution exhibits a power-law spectral density $S(k) \propto k^{-\alpha}$ with $\alpha > 1$. This result is in remarkable contrast to the one exhibited by 2D disordered media with uncorrelated disorder, which do not display a metal-insulator transition

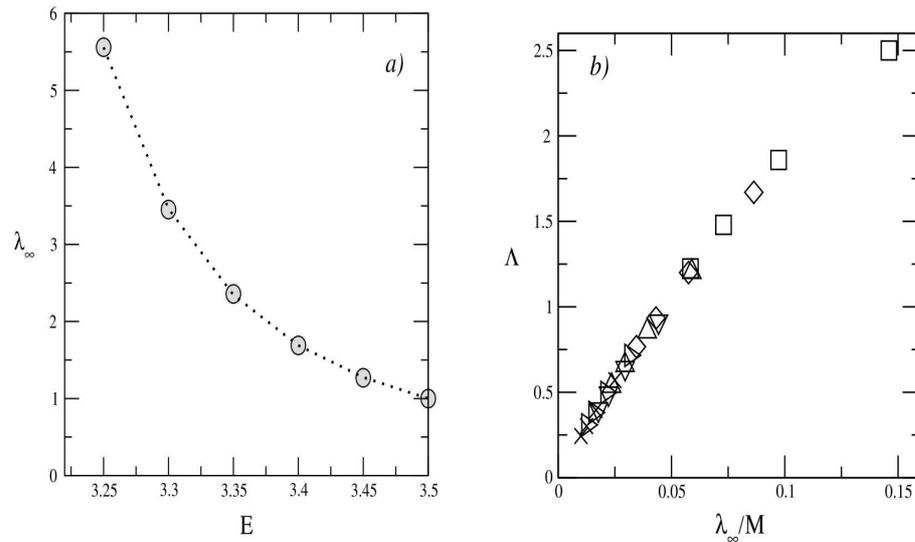


Fig. 4. (a) Fit of the extrapolated localization length $\lambda_{\infty} \propto \exp(C/\sqrt{E-E_c})$ with $E_c = 3.00(5)$. This scaling behavior is typical of a Kosterlitz–Thouless transition. (b) Data collapse of the scaled localization length in the universal scaling form, thus supporting the accuracy of the estimated extrapolated localization lengths.

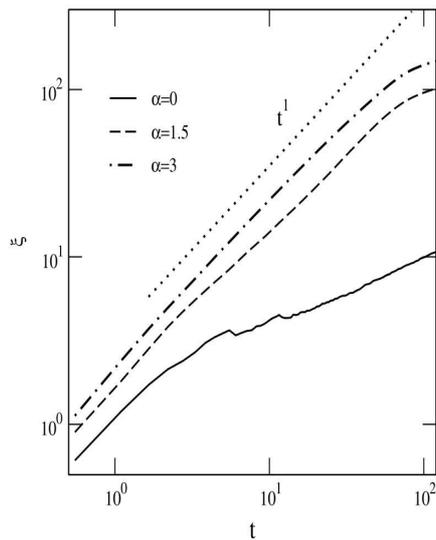


Fig. 5. The mean-square displacement $\xi(t)$ of a one-electron wave-packet computed in a square lattice with 3000×3000 sites and $\alpha = 0, 1.5$ and 3 . A nearly ballistic spread ($\xi(t) \propto t$) takes place in the regime of strong correlations in the longitudinal hopping distribution ($\alpha > 1$).

for any amount of disorder. In addition, we followed the time evolution of an initially localized wave-packet. Within our numerical precision, we found that associated with the metal–insulator transition, a ballistic wave-packet propagation takes place. We hope that the present work will stimulate further studies on semiconductors and superlattices with intentional long-range correlated off-diagonal disorder.

Acknowledgements

This work was financially supported by CNPq-Rede Nanobioestruturas, CAPES, FINEP, PRONEX/CNPq/FAPEAL and FACEPE.

References

- [1] G. Khitrova, H.M. Gibbs, F. Jahnke, M. Kira, S.W. Koch, *Rev. Mod. Phys.* 71 (1999) 1591.

- [2] See contributions to: G.W. Briant, G.S. Solomonm (Eds.), *Optics of Quantum Dots and Wires*, Artech House, Boston, 2005.
- [3] T. Brandes, *Phys. Rep.* 408 (2005) 315.
- [4] J.R. Tischler, M.S. Bradley, Q. Zhang, T. Atay, A. Nurmiko, V. Bulović, *Org. Electronics* 8 (2007) 94.
- [5] E.L. Albuquerque, M.G. Cottam, *Phys. Rep.* 376 (2003) 225; E.L. Albuquerque, M.G. Cottam, *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*, Elsevier, Amsterdam, 2004.
- [6] E. Maciá, *Aperiodic Structures in Condensed Matter*, CRC Press, Boca Raton, 2009.
- [7] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* 109 (1958) 1492.
- [8] N.F. Mott, *J. Non-Cryst. Solids* 1 (1968) 1.
- [9] N. Mott, W.D. Twose, *Adv. Phys.* 10 (1961) 107.
- [10] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 673.
- [11] G. Theodorou, M.H. Cohen, *Phys. Rev. B* 13 (1976) 4597.
- [12] H. Fiedler, J. Knoester, D.A. Wiersma, *J. Chem. Phys.* 95 (1991) 7880.
- [13] G.G. Koslov, V.A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, A. Rodríguez, *Phys. Rev. B* 58 (1998) 5367.
- [14] A. Eilmes, R.A. Roemer, M. Schreiber, *Physica B* 296 (2001) 46.
- [15] J.C. Flores, *J. Phys.: Condens. Matter* 1 (1989) 8471.
- [16] D.H. Dunlap, H.-L. Wu, P.W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 88.
- [17] P.W. Phillips, H.-L. Wu, *Science* 252 (1991) 1805.
- [18] A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, *J. Phys. A: Math. Gen.* 27 (1994) 3725; A. Sánchez, E. Maciá, F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 147.
- [19] E. Diez, A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 14359; F. Domínguez-Adame, E. Diez, A. Sánchez, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 8115.
- [20] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2159.
- [21] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 3735; F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 199; F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Physica A* 266 (1999) 465.
- [22] F.M. Izrailev, A.A. Krokhnin, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 4062.
- [23] U. Kuhl, F.M. Izrailev, A.A. Krokhnin, H.-J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 633.
- [24] W.-S. Liu, T. Chen, S.J. Xiong, *J. Phys.: Condens. Matter* 11 (1999) 6883.
- [25] W.-S. Liu, S.Y. Liu, X.L. Lei, *Eur. Phys. J. B* 33 (2003) 293.
- [26] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, *Europhys. Lett.* 66 (2004) 585.
- [27] I.F. dos Santos, F.A.B. F de Moura, M.L. Lyra, M.D. Coutinho-Filho, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007) 476213.
- [28] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007) 056204.

Anexo **B**

Artigo: Dois Mágns em cadeias
ferromagnéticas com desordem correlacionada



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jmmm

Delocalized 2-magnons eigenstates in long-range correlated random Heisenberg chains

W.S. Dias, E.M. Nascimento, F.A.B.F. de Moura*, M.L. Lyra

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió, AL, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 19 November 2008

Received in revised form

15 January 2009

Available online 27 February 2009

PACS:

73.20.Jc

75.10.Pq

75.30.Ds

Keywords:

Disordered systems

Phase transitions

Spin dynamics

Quantum localization

ABSTRACT

We consider the one-dimensional quantum disordered $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg ferromagnetic chain model with long-range correlated exchange couplings and study the nature of collective two-spin excitations. By using an exact diagonalization of the Hamiltonian in the two-spin flip subspace, we compute the spin wave participation number to characterize the localized or delocalized nature of the two-magnon states. For strongly correlated random exchange couplings, extended two-spin excitations with finite energy appear. Integrating the time-dependent Schrödinger equation, we follow the time-evolution of an initially localized two-spin state. We find that, associated with the emergence of extended spin waves, the wave-packet mean-square displacement develops a ballistic spread. Further, the single-spin wave-packet acquires an asymmetric profile due to the kinematic interaction between the excited spins.

© 2009 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The Anderson theory plays a key role on the localization properties of eigenfunctions in disordered systems [1,2]. The localization–delocalization transition for weak disorder in three-dimensional geometries, and its absence in low dimensional systems with time reversal symmetry at any disorder strength, are its most known predictions. The critical exponent ν that describes the divergence of the localization length $\xi_{\infty} \propto |E - E_c|^{-\nu}$, where E indicates the Fermi energy and E_c stands for the mobility edges separating extended from localized states, is directly related to the exponent μ for the conductivity at zero temperature in doped semiconductors and amorphous materials [3–5]. The localization of collective excitations by a random potential is a quite general feature. It applies, for example, to the study of magnon localization in random ferromagnets and vibrational modes in harmonic systems. In fact, it is possible to map the Heisenberg Hamiltonian, as well as the one-dimensional harmonic chain with random masses, into the Anderson model for disordered electronic systems with correlated disorder [6–10,14,15].

Several works have been devoted to the study of the localization properties of spin waves in low dimensional quantum

Heisenberg ferromagnets. Localization is known to have a profound impact on the transport properties of magnetic systems. In general, it has been demonstrated that the finite energy spin waves are exponentially localized for any degree of disorder. However, the typical localization length diverges as one approaches to the bottom of the band [6–9]. In addition, it was shown that an initially localized spin excitation may exhibit a super-diffusive spread in the presence of disorder in contrast to the random oscillations over a finite segment displayed by an electronic wave-packet [9,10]. Further, the diffusion of spin waves in ferromagnetic host systems with antiferromagnetic impurities shows no evidence of strong localization [11]. Also, the effects of localization in the spin and charge conductivity of ferromagnetic systems have been theoretically evaluated [12,13]. Recently, the one-dimensional quantum Heisenberg ferromagnet with exchange couplings exhibiting long-range correlated disorder was studied [14]. Using renormalization group, integration of the equations of motion and exact diagonalization, it was shown that extended states appears for sufficiently strong correlations. In fact, correlated disorder was shown to be a key ingredient to promote delocalization in low dimensional systems [16–20].

Some static and dynamic properties associated with the two-magnon excitations in finite $S = \frac{1}{2}$ ferromagnetic chains with uncorrelated disorder were studied in Ref. [21]. As a $S = \frac{1}{2}$ spin only allows for a single excitation, i.e., two-spin excitations can never occupy the same site, the effective spin–spin interaction is

* Corresponding author.

E-mail address: fidelis@if.ufal.br (F.A.B.F. de Moura).

closely related to an infinite strength Hubbard repulsion. It was shown that the localization length of high-energy states are rather small but diverges as one approaches the ground state energy. The long localization length of the low-energy states give rises to strong spin–spin correlations which are suppressed at high energies as the localization length becomes smaller than the chain size. Further, the time-evolution of two initially localized spin deviations was followed. It was shown that the single-spin wave-packet develops asymmetric tails due to the effective spin–spin repulsion with distinct scaling exponents governing the temporal evolution of length scales related to the average spin–spin distance and the wave-packet dispersion [21].

In this work, we study the two-magnon excitations in the one-dimensional quantum disordered $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg ferromagnet chain model with long-range correlated exchange couplings. By using an exact diagonalization approach, we compute the spin-wave participation number which will be used as a measure of the spacial extension of the two-spin excitations. The numerical calculations indicate that, in the regime of strongly correlated random exchange couplings, there are extended spin waves with finite excitation energies. We will also follow the time-evolution of the mean-square displacement of the wave-packet. We will explore the influence of the kinematic repulsion between the two magnons and the emergence of extended states on the dynamics of two-spin excitations.

2. Model and formalism

We will consider finite disordered chains with N spins ($S = \frac{1}{2}$) coupled via a first neighbors isotropic Heisenberg exchange interaction, whose Hamiltonian can be written as

$$H = - \sum_n J_{n,n+1} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}. \tag{1}$$

The couplings $J_{n,n+1} = J_n$ will be considered as long-range correlated random ferromagnetic exchange integrals. In order to generate exchange sequences with power-law decaying pair correlation function, we firstly generate the following auxiliary sequence:

$$x_n = \tanh \left[\sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos \left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k \right) \right], \tag{2}$$

which is restricted to the interval $-1 \leq x_n \leq 1$ and whose pair correlation function decays asymptotically as $1/r^\alpha$. The hyperbolic transformation of the series brings the advantage of bounding the interval of the random variable without changing its asymptotic correlation function. Such power-law decaying correlation function actually characterizes the absence of a typical correlation length in the disorder distribution and allows the investigation of the influence of scale-free disorder on the properties of the collective magnetic excitations. In the above equation, k is the wave-vector of the modulations on the random variable landscape, ϕ_k are $N/2$ random phases uniformly distributed in the interval $[0, 2\pi]$ and the exponent α controls the degree of correlations. The sequence of exchange integrals is obtained after normalizing the auxiliary sequence to have unitary variance (Δx) and displacing it to avoid negative (antiferromagnetic) couplings. In the following, we use $J_n = 2 + x_n/\Delta x$. With the above procedure, the distribution of couplings has sharp edges for any value of α , which results on long-range correlated sequences of strictly ferromagnetic couplings even when very large chains are considered.

For $\alpha = 0$, we recover an uncorrelated random ferromagnetic couplings distribution. The ground state for a ferromagnetic chain

consists of a perfectly ordered chain with all spins aligned on the same direction. We will refer to the ground state as the vacuum state $|0\rangle$ in what concerns to the presence of magnetic excitations. One-magnon states are the Hamiltonian eigenstates on the sub-space generated by all single flip states $|\phi_n\rangle = S_n^-|0\rangle$. In the presence of disorder, the one-magnon states are spatially localized, with the characteristic localization length diverging as one approaches the bottom of the excitation energy band. Here, we will explore the nature of the Hamiltonian eigenstates on the sub-space generated by all two flip states. The basis for this sub-space can be represented by $|\phi_{n_1,n_2}\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- |0\rangle$ where $|\phi_{n_1,n_2}\rangle$ is the state with spin flips located at sites n_1 and n_2 .

In order to characterize the nature of the two-magnon eigenstates, we solve the time-independent Schroedinger equation to obtain the coefficients ϕ_{n_1,n_2} in the expansion over the two-flip bases $|\Phi\rangle = \sum \phi_{n_1,n_2} |\phi_{n_1,n_2}\rangle$. The coefficients obey the following recursion relation:

$$2\varepsilon\phi_{n_1,n_2} = (J_{n_1-1,n_1} + J_{n_1,n_1+1} + J_{n_2-1,n_2} + J_{n_2,n_2+1})\phi_{n_1,n_2} - J_{n_1,n_1+1}\phi_{n_1+1,n_2} - J_{n_2,n_2+1}\phi_{n_1,n_2+1} - J_{n_1,n_1-1}\phi_{n_1-1,n_2} - J_{n_2-1,n_2}\phi_{n_1,n_2-1} \tag{3}$$

for the case of n_1 and n_2 not being neighboring sites. The eigenstate coefficient for spin flips at neighboring sites follows a simpler recursive relation in the form:

$$2\varepsilon\phi_{n,n+1} = (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2})\phi_{n,n+1} - J_{n+1,n+2}\phi_{n,n+2} - J_{n-1,n}\phi_{n-1,n+1}. \tag{4}$$

The above set of $N(N - 1)/2$ equations provides the coefficients of all two-magnon eigenstates. As the numerical algorithm requires the diagonalization of $M \times M$ matrices, with $M = N(N - 1)/2$, we are restricted to compute the two-magnon states on relatively small chains. In order to infer about the limit of infinite chains, we will employ a finite-size scaling analysis. In the next section, we will show results derived from the stationary states on chains with $N = 21, 41, 81$ and 101 spins. Distinct realizations of the distribution of exchange couplings will be used to perform a configurational average over the disorder, namely 8000 realizations for the smallest chain size and 500 realizations for the largest one. In order to study the spacial distribution of the two-magnon states, we computed the participation number of each eigen-state defined as

$$P = \frac{1}{\sum_{n_1 < n_2} |\phi_{n_1,n_2}|^4}. \tag{5}$$

For extended two-magnon states, the participation number shall scale as N^2 (actually the maximum participation number is $M = N(N - 1)/2$ for a uniform state). The states with localization lengths much smaller than the chain size have size-independent participation numbers. In addition, we will investigate the time evolution of a wave-packet initially composed of two flipped spins at a distance d_0 . We solve numerically the time-dependent Schroedinger equation $i\hbar d/dt |\Phi(t)\rangle = H |\Phi(t)\rangle$ where H is Hamiltonian (1) and $|\Phi(t)\rangle = \sum_{n_1 < n_2} \phi_{n_1,n_2}(t) |\phi_{n_1,n_2}\rangle$. The time-dependent coefficients $\phi_{n_1,n_2}(t)$ obey a set of differential equations, derived from (4), for spin deviations at neighboring sites and from (3) for non-neighboring deviations, namely

$$i \frac{d\phi_{n,n+1}(t)}{dt} = (J_{n-1,n} + J_{n+1,n+2})\phi_{n,n+1}(t) - J_{n+1,n+2}\phi_{n,n+2}(t) - J_{n-1,n}\phi_{n-1,n+1}(t) \tag{6}$$

and

$$i \frac{d\phi_{n_1, n_2}(t)}{dt} = (J_{n_1-1, n_1} + J_{n_1, n_1+1} + J_{n_2-1, n_2} + J_{n_2, n_2+1})\phi_{n_1, n_2}(t) - J_{n_1, n_1+1}\phi_{n_1+1, n_2}(t) - J_{n_2, n_2+1}\phi_{n_1, n_2+1}(t) - J_{n_1, n_1-1}\phi_{n_1-1, n_2}(t) - J_{n_2-1, n_2}\phi_{n_1, n_2-1}(t),$$

$$n_2 > n_1 + 1, \quad (7)$$

where we used units of $\hbar = 1$. We solved these equations numerically by using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator:

$$V(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}, \quad (8)$$

where H is the Hamiltonian. The wave-function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. The method can be used recursively to obtain the wave-function at time t . The following results were taken by using $\Delta t = 0.05$ and the sum was truncated at $n_0 = 20$. This cutoff was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered. We followed the time-evolution of the spacial extension of the two-magnon states defined as

$$\xi(t) = \sum_{n_1 < n_2} |\phi_{n_1, n_2}(t)|^2 \sqrt{(n_1 - \langle n_1(t) \rangle)^2 + (n_2 - \langle n_2(t) \rangle)^2}, \quad (9)$$

where

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1 < n_2} n_i |\phi_{n_1, n_2}(t)|^2, \quad i = 1, 2. \quad (10)$$

The spacial extension $\xi(t)$ gives a measure of the wave-function spread on the $n_1 \times n_2$ plane.

3. Results

In Fig. 1, we show results for the scaled participation number $P(E)/M$ ($M = N(N-1)/2$) versus energy E taking into account all states within a small energy window around E . Results were obtained using exact diagonalization on chains with $N = 41, 61, 81$ and 101 sites and (a) $\alpha = 0$ and (b) $\alpha = 3$. For $\alpha = 0$ our results show that the high-energy states are well localized presenting a short localization length. The collapse of data from distinct chain sizes at $E = 0$ indicates that the low-energy spin excitations have finite localization lengths much larger than the chain sizes considered. The normalized participation has a pronounced decrease around $E \simeq 6$. This is the typical energy scale that

delimits the pseudo-band edge above which the density of states decays exponentially and the states are strongly localized. For $\alpha = 3$ the scaled participation number $P(E)/M$ displays a well-defined data collapse in the low energy regime. This result suggests the existence of a phase of extended two-magnon states. We collected in Fig. 2 results for the scaled participation function near the band bottom $P(E < 1)/M$ versus the exponent α of the power-law spectral density of the correlated potential for lattices with $N = 41, 61, 81, 101$ sites. For $\alpha > 2$ the scaled participation function $P(E < 1)/M$ becomes size independent, i.e., the participation function is proportional to $M = N(N-1)/2$. This feature is a clear signature of the existence of extended states at the band bottom for $\alpha > 2$.

The time evolution of the spacial extension $\xi(t)$, obtained by numerical integration of the time-dependent Schroedinger equation, is shown in Fig. 3. A configurational average over 30 distinct runs was employed in chains with $N = 2000$ sites. In the absence of correlations ($\alpha = 0$), a diffusive-like spread, $\xi(t) \propto t^{0.50(5)}$, is observed after a short transient. This behavior is in agreement with the previous literature on the dynamics of one and two-magnons in uncorrelated random ferromagnets [9,21]. For $\alpha = 3$, the wave-packet presents a ballistic spread before reaching the lattice boundaries $\xi(t) \propto t^1$. This result gives further support to the previous indication that this ferromagnetic chain displays a

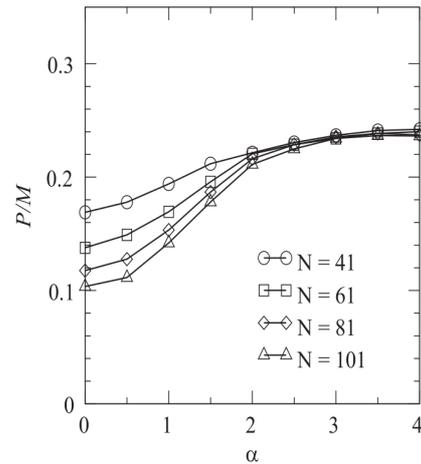


Fig. 2. Scaled participation number P/M ($M = N(N-1)/2$) versus α for $N = 41, 61, 81$ and 101 . For $\alpha > 2$, P/M is roughly size independent indicating extended states.

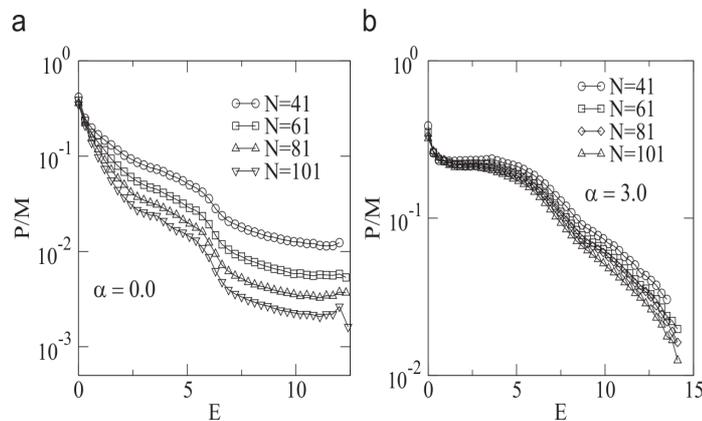


Fig. 1. Scaled participation number P/M ($M = N(N-1)/2$) versus energy for (a) $\alpha = 0$ and (b) $\alpha = 3$. The data collapse observed in the low-energy regime of the strongly correlated chain is a signature of extended two-magnon states.

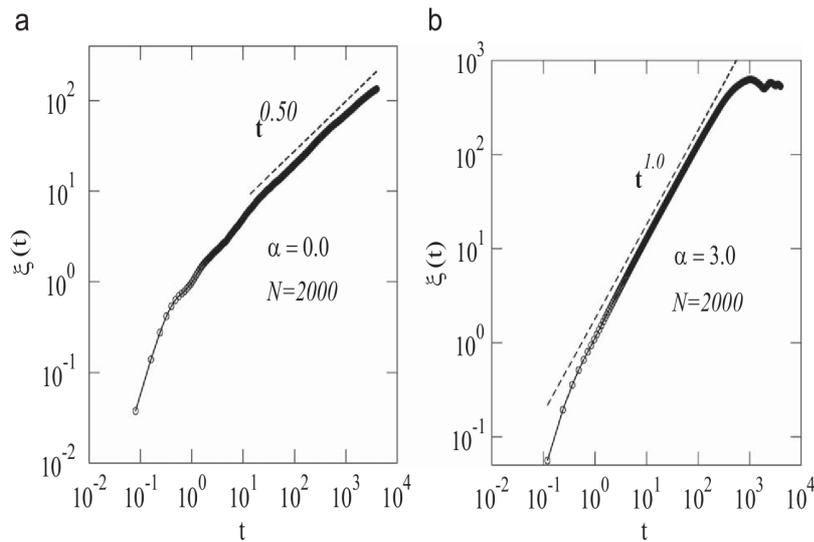


Fig. 3. The spatial extension $\xi(t)$ versus time t for $N = 2000$ and for (a) $\alpha = 0$ and (b) $\alpha = 3$. For $\alpha = 0$, the spatial extension $\xi(t)$ displays an asymptotic diffusive spread, $\xi(t) \propto t^{0.5}$. For $\alpha = 3$, the spatial extension shows a ballistic dynamics $\xi(t) \propto t^1$.

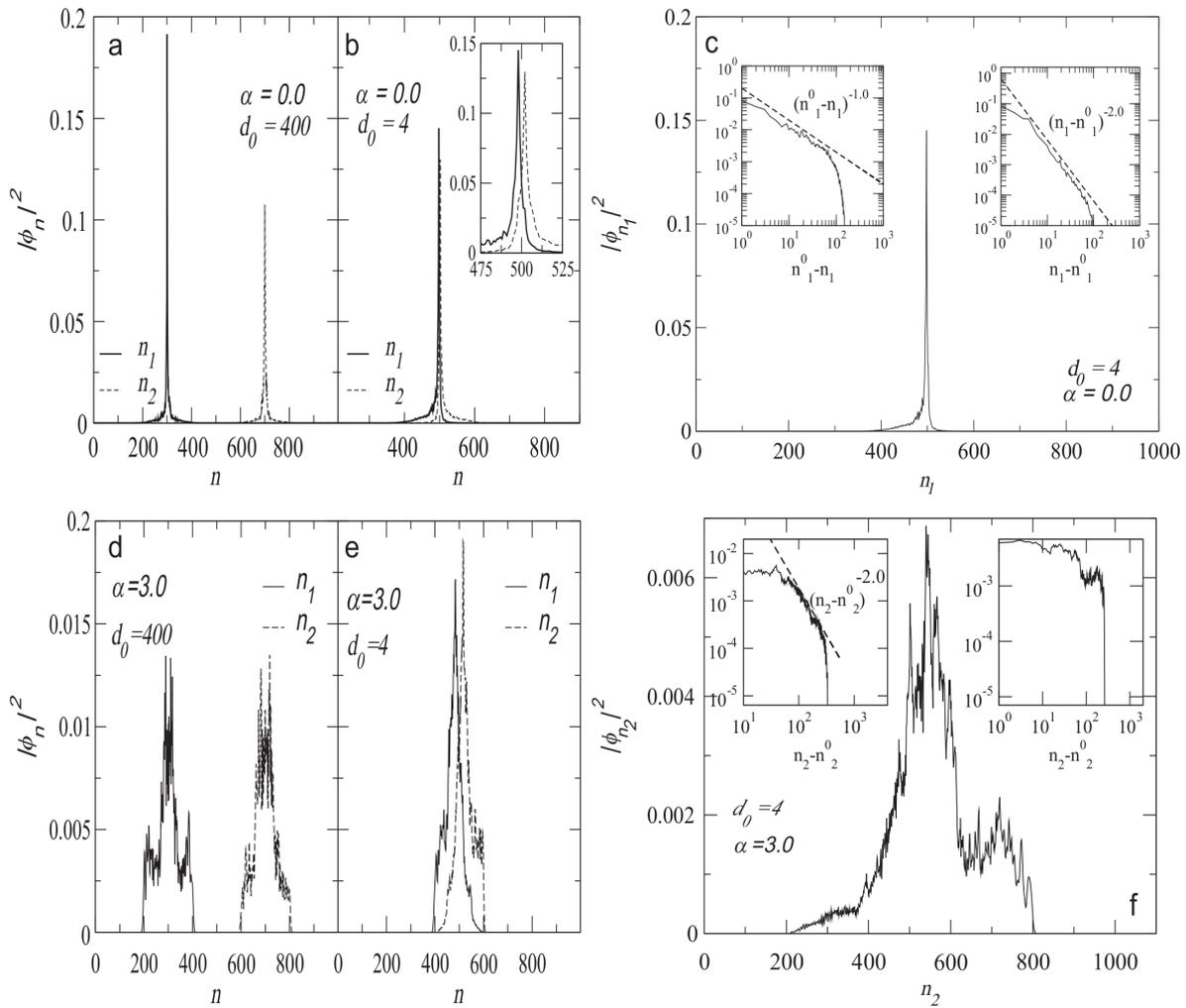


Fig. 4. (a–c) Asymptotic distribution of the single-spin wave-packet in a chain with $N = 1000$ spins with random uncorrelated exchange couplings ($\alpha = 0$). Calculations were averaged over 50 realizations. The initial state have spin deviations at sites $n_1 = N/2 - d_0$ and $n_2 = N/2 + d_0$. Notices that the wave-packet exhibits asymmetric tails for small d_0 . The insets (b and c) characterize the power-law decay of each tail. The larger decay exponent of the right side of the wave-packet reflects the effective repulsion between the spin deviations. The cutoff is a finite-time effect. Asymmetric profiles were also obtained in the regime of strongly correlated disorder (d–f) for $\alpha = 3$. In the internal region the same quadratic decay obtained for the uncorrelated case is achieved. In the exterior region, only the finite-time cutoff is present with no power-law regime.

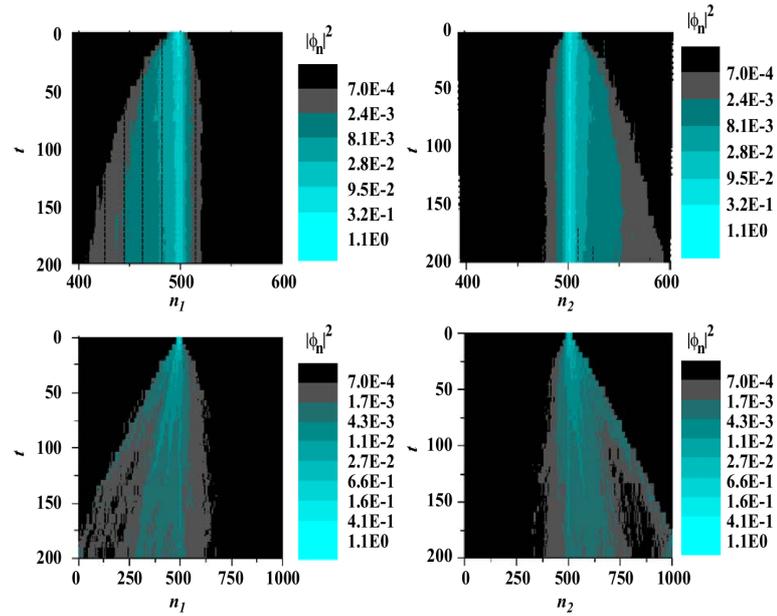


Fig. 5. Time evolution of the wave-function $|\phi_n(t)|^2$ versus t and n computed using $N = 1000$, $d_0 = 2$ and $\alpha = 0$ (a) and $\alpha = 3$ (b). For $\alpha = 0$ a finite fraction of the wave-packet remains trapped on the initial site. For $\alpha = 3$ the wave-packet spread is ballistic towards the free chain side. In both cases, the wave-packet spreads slower towards the region where the second spin flip is located due to the effective kinematic repulsion between the spins.

phase of extended two-magnons states induced by long-range correlated exchange couplings.

The long-time one-magnon wave-packet is strongly influenced by the effective kinematic interaction between the two magnons. In Fig. 4, we report the one-magnon wave-packet profile ($|\phi_n|^2 = \sum_m |\phi_{n,m}(t)|^2$) computed using $N = 1000$, $\alpha = 0$ and $d_0 = 200$ (a) and $d_0 = 4$ (b,c). One notices in (b) and (c) that the single-spin wave-packet develops power-law tails with distinct characteristic exponents on each side. The larger decay exponent is a consequence of the effective repulsion between the spins which difficult the single-spin wave-packet to spread towards the region predominantly occupied by the second spin excitation. For $d_0 = 200$, no distortion of the single-spin wave-packet was observed, reflecting the absence of effective interaction between the spins up to the time scale reported (see Fig. 4(a)). In the presence of strongly correlated disorder (see Fig. 4(d-f)) the distortion of the single-spin wave-packet was also detected for small d_0 . In this case, due to the presence of an energy band of extended states, the width of each spin wave-packet becomes much larger than in (a-c) case for $\alpha = 0$. Therefore, the effective repulsion between the spins is stronger resulting in a highly asymmetric profile. The same quadratic decay results from the kinematic repulsion. In the exterior region, no power-law regime sets up. The wave-packet just exhibits a sharp cutoff that signals the wave-packet front. The structure observed in these wider wave-packets reflects the random nature of the underlying exchange integrals which promotes random scattering of the wave-packet. The asymmetric time-evolution of the wave-packet is more clearly illustrated in Fig. 5 which shows the time-evolution of both magnons through the lattice. This calculation was done using $N = 1000$, $d_0 = 4$ and $\alpha = 0$ (a) and $\alpha = 3$ (b). The effective kinematic repulsion between the spins is reflected by the small spread of the wave-packet toward the region occupied by the second spin excitation, an effect which is quite more evident in the case of strongly correlated exchanges.

Finally, we study in Fig. 6 the time dependence of the wave-packet centroid of both magnons ($\langle n_1(t) \rangle$ and $\langle n_2(t) \rangle$), as well as

the time dependence of the correlation function $\zeta(t) = \langle n_1(t)n_2(t) \rangle - \langle n_1(t) \rangle \langle n_2(t) \rangle$. These calculations were performed for $N = 2000$, and two typical values of d_0 and α . In agreement with Figs. 5 and 6, these figures further characterize the role played by the effective kinematic repulsion between the spins. Particularly, a pronounced collision effect is observed for $\alpha = 3$ (see Fig. 6(d)). It results from the competition between the ballistic propagation driven by the extended states and the effective kinematic repulsion. In Fig. 6(e), the time dependent correlation function for $\alpha = 0$ is only weakly increasing with time reflecting the localized character and the diffusive spread of both magnons. On the other hand, $\zeta(t)$ grows much faster for $\alpha = 3$ corroborating our previous finding of a strong repulsion due to the presence of extended two-magnon states in the regime of long-range correlated disorder. The initial plateaus represent the regime on which the two excitations have a negligible overlap. In this regime, the correlation function is very small and below the accuracy of the numerical integration of the time-dependent Schrödinger equation. The discontinuity of the derivative actually signals the collision time after which the magnons start to repel each other.

4. Summary and conclusions

In summary, we investigated some stationary and dynamical aspects of two-magnon excitations in one-dimensional quantum disordered $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg ferromagnet chains with long-range correlated exchange couplings. To introduce long-range correlations in this system, we considered a Fourier method to construct a on-site energy sequence with spectral density $S(k) \propto 1/k^2$. Using an exact diagonalization formalism, we investigated the participation function of all energy eigenstates. For weakly correlated exchange couplings ($\alpha < 2$), the two-magnons states remain exponentially localized, similar to the Anderson localization of single-spin collective excitations. The high-energy spin-excitations have rather small localization lengths. However, the

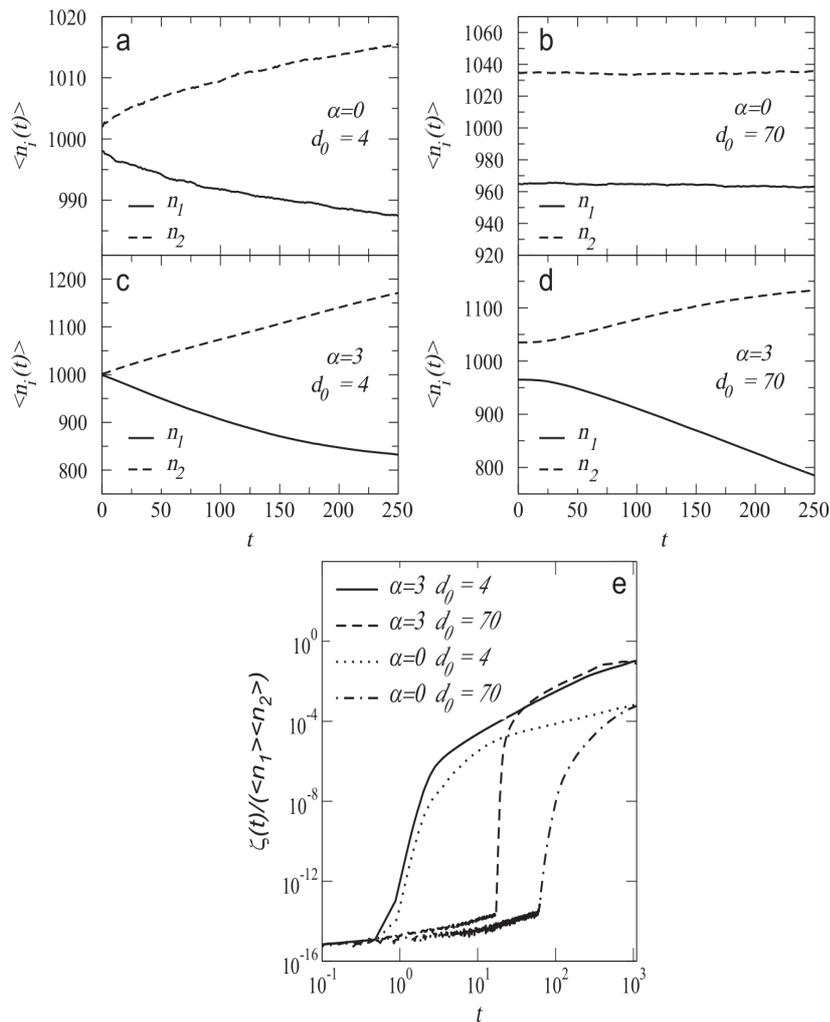


Fig. 6. (a–d) Time dependent wave-packet centroid of both magnons ($\langle n_1(t) \rangle$ and $\langle n_2(t) \rangle$) as well as (e) the time dependent correlation function $\zeta(t) = \langle n_1(t)n_2(t) \rangle - \langle n_1(t) \rangle \langle n_2(t) \rangle$. Calculations were done for $N = 2000$, $d_0 = 4$ and 70 , while $\alpha = 0$ and 3 . Notice that the kinematic interaction repels the wave-packet centroids. This effect is enhanced in the regime of strongly correlated disorder which results in more correlated wave-packets. The initial plateaus in the time-dependent correlation function is due to the finite accuracy of the numerical integration and actually represent the regime on which the two excitations have a negligible overlap.

localization length diverges as one approaches to the ground state. The numerical calculations indicated that, for strongly correlated random exchange couplings, extended spin waves appear for nonzero energies. Using the participation number scaling near the band bottom, we showed that a band of extended states appears for $\alpha > 2$. By integration of the time-dependent Schroedinger equation, we computed the mean-square displacement of the wave-packet. We found that, associated with the emergence of extended spin waves for $\alpha > 2$, the wave-packet mean-square displacement displays a ballistic spread, in contrast with the diffusive dynamics in the case of uncorrelated random exchanges. This result further characterizes the extended nature of the low-energy states in the strongly correlated regime. Moreover, we showed that the one-magnon wave-packet develops an asymmetric profile due to the effective kinematic repulsion between the magnons. In the interior region of the chain, the wave-packet develops a quadratically decaying tail irrespective to the presence of correlations. On the other hand, the $1/r$ decay typical of uncorrelated random ferromagnets, associated with the diffusive spread to the exterior region, is replaced by a sharp cutoff in the

presence of strong correlations with no intermediate power-law regime. The combined effect of the kinematic repulsion and ballistic dynamics in the strongly correlated regime leads to the build up of spin–spin correlations which are substantially larger than in ferromagnetic chains with uncorrelated disorder. We hope that the present work will stimulate further studies of the transport of interacting magnetic excitations in correlated disordered magnets.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq-Rede Nanobioestruturas, CAPES (Brazilian research agencies) and FAPEAL (Alagoas State agency).

References

- [1] T.A.L. Ziman, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 337
For a review see, e.g., B. Kramer, A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. 56 (1993) 1469.

- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 673
For a review see, e.g., I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, L.A. Pastur, Introduction to the Theory of Disordered Systems, Wiley, New York, 1988.
- [3] K. Slevin, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 382.
- [4] K. Slevin, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 4083.
- [5] Y. Asada, K. Slevin, T. Ohtsuki, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74 (2005) 238.
- [6] T.A.L. Ziman, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 337.
- [7] G. Theodorou, J. Phys. C 15 (1982) L1315.
- [8] R. Riklund, M. Severin, J. Phys. C 21 (1988) L965.
- [9] S.N. Evangelou, D.E. Katsanos, Phys. Lett. A 164 (1992) 456.
- [10] S.N. Evangelou, A.Z. Wang, S.J. Xiong, J. Phys. Condens. Matter 6 (1994) 4937.
- [11] M. Crisan, L. Tataru, J. Magn. Magn. Mater. 138 (1994) 57.
- [12] V.K. Dugaev, P. Bruno, J. Barnaś, J. Magn. Magn. Mater. 240 (2002) 200.
- [13] V.K. Dugaev, P. Bruno, J. Barnaś, J. Magn. Magn. Mater. 242 (2002) 461.
- [14] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, Phys. Rev. B 66 (2002) 014418.
- [15] P. Dean, Proc. Phys. Soc. 84 (1964) 727.
- [16] F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 4062;
F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, S.E. Ulloa, Phys. Rev. B 63 (2001) 41102.
- [17] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 3735;
F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Physica A 266 (1999) 465.
- [18] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, Phys. Rev. 68 (2003) 012202.
- [19] F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 197402.
- [20] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, Europhys. Lett. 66 (2004) 585.
- [21] E.M. Nascimento, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Phys. Rev. B 72 (2005) 224420.

Anexo **C**

Artigo: Dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas



Contents lists available at ScienceDirect

Physics Letters A

www.elsevier.com/locate/pla



The role of Hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons

W.S. Dias, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura*

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió AL 57072-970, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 26 August 2010

Accepted 1 September 2010

Available online 6 September 2010

Communicated by V.M. Agranovich

Keywords:

Wave-packet dynamics

Bloch oscillation

Hubbard interaction

ABSTRACT

We study the effects of a Hubbard-like interaction on the dynamics of two electrons restricted to move in a linear chain. Our calculations suggest that the presence of bounded two-electron states in the initial Gaussian wave-packet plays significant roles on both unbiased and the electric-field biased wave-packet dynamics.

© 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.

Advancing the understanding of the transport properties of interacting electrons in low dimensional systems usually consists of a step ahead in condensed matter theory. Usually, the presence of a Coulomb repulsion term ($U \propto e^2/r$) challenges the theoretical treatment of the many body Hamiltonians. However, the competitive electric forces and the presence of mobile charge carriers promote the damping of electric fields, also called screening. The resulting electronic interaction, called screened Coulomb potential, is exponentially damped. Therefore, from the quantum mechanics point of view an extremely short-ranged repulsive Coulomb interaction i.e., an effective on-site Coulomb repulsion U can be used to simulate the electron–electron interaction. The Hubbard model is the most used Hamiltonian model describing systems of itinerant electrons within the on-site electron–electron interaction framework. From the analytical point of view in the absence of on site disorder, the most remarkable development was introduced about 60th years through the exact solution of a one-dimensional (1D) model of interacting spinless bosons by Lieb [1]. By using a Bethe ansatz formalism, a complete solution in the absence of disorder was provided as a function of the interaction strength. For the infinite Coulomb interaction limit, the Lieb–Liniger model [1] showed that strongly interacting bosons effectively behave like noninteracting fermions, i.e. the well-known model of impenetrable bosons discussed by Girardeau [2]. Following the Bethe ansatz framework introduced in [1], the problem of N interacting fermions without disorder moving in 1D was solved by Lieb and other authors [3]. Furthermore, it was shown that Hubbard systems can display a correlation-driven transition, called Mott-transition, from a paramagnetic metal to a paramagnetic insulator [4–13]. Studies of the

Hubbard model reveal a wealthy of new phenomena in low dimensional electronic systems. One of the most famous applications, pointed by Anderson, consists of the understanding of the mechanisms underlying the high- T_c superconductivity observed in CuO_2 compounds [11–13]. Even within the on-site Coulomb interaction formalism, the analytical or numerical study of many body systems represents a hard task due to the fact that the number of electronic configurations grows exponentially with the system size.

More recently, the competitive role between dynamical localization and electron–electron interaction was reported [14–18]. It was shown that the N -particle problem is identical to that of a single particle moving in an N -dimensional lattice, with defect surfaces dividing the space in symmetric domains. It has been shown that in the limit of weak hopping integral, the electron–electron interaction induces an additional oscillation of the eigenstates drift velocity. The period of this oscillation was found to be determined solely by the range and strength of the electron–electron interaction [14]. Furthermore, the two-electron problem on a one-dimensional lattice subject to a static electric field was revisited in Ref. [17]. It was numerically demonstrated the existence of a frequency doubling of the Bloch oscillations as a function of the two-electrons interaction. As the interaction is turned on, the emergence of bounded states correlates the two electrons dynamics. In an intermediate range of interaction strengths, the initial state is mostly superposed to bound states and, therefore, the double occupancy remains close to unity. This means that the electrons behave as a single particle executing coherent hoppings. The coupled electrons effectively behave as a single particle with charge $2e$, thus explaining the frequency doubling of the Bloch oscillations. The frequency doubling phenomenon for intermediate electron–electron couplings was also obtained in 1D chains with a long-range correlated on-site disorder distribution [18].

* Corresponding author. Tels.: +55 82 3214 1429, +55 82 3214 1645.

E-mail address: fidelis@f.ufal.br (F.A.B.F. de Moura).

In this work, we report further progress along the above lines. Our main aim is to focus on the influence of the on-site Coulomb interaction and of a static electric field in the dynamics of two-electrons restricted to move in a low dimensional lattice. The frequency doubling phenomenon previously reported in Refs. [17,18] as a consequence of bounded states present in the two-electron spectrum will be discussed in detail, pointing out the role of those states plays in the electronic biased transport. To this end, we use numerical methods to solve the Schrödinger equation and follow the wave-packet dynamics of two electrons in a 1D pure chain. Starting from an initial Gaussian wave-packet in the absence of an electric field, we show a non-usual dynamics associated with the two-electrons wave packet. The wave-packet width grows ballistically even in the regime of strong Coulomb interaction. However, for $U > 0$, the participation number shows a slower spread. Our calculations suggest that this unusual behavior is related to the presence of bound states in the initial Gaussian wave-packet. In addition, the electric-field biased wave-packet dynamics was revisited. We numerically show that the spatial extension of the Bloch oscillations depends non-monotonically on the electron–electron coupling and that the contribution of bounded states to the wave-packet dynamics is strongly dependent of the overall wave-vector of the initial wave-packet.

1. Model and formalism

The tight-binding Hamiltonian for two interacting electrons in the presence of a static uniform electric field F is given by [14–21]

$$H = \sum_n \sum_s W (c_{n+1,s}^\dagger c_{n,s} + c_{n,s}^\dagger c_{n+1,s}) + \sum_n \sum_s [\epsilon_n + eF n] c_{n,s}^\dagger c_{n,s} + \sum_n U c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \quad (1)$$

where $c_{n,s}$ and $c_{n,s}^\dagger$ are the annihilation and creation operators for the electron at site n with spin s , \mathbf{n} is the position operator, W is the hopping amplitude, U is the on-site Hubbard electron–electron interaction and e is the electron charge. Here we are considering the external electric field applied parallel to the chain length. In order to follow the time evolution of wave-packets, we solve the time dependent Schrödinger equation by expanding the wave-function in the Wannier representation $|\Phi(t)\rangle = \sum_{n,m} f_{n,m}(t) |ns_1, ms_2\rangle$ where the ket $|ns_1, ms_2\rangle$ represents a state with one electron with spin s_1 at site n and the other electron with spin s_2 at site m . In order to allow for double occupancy of the on-site orbital, we will consider in the following that the electrons are in distinct spin states (singlet state). Once the initial state is prepared as a direct product of states, the electrons will always be distinguishable by their spins since the Hamiltonian does not involve spin exchange interactions. The time evolution of the wave-function in the Wannier representation becomes

$$i \frac{df_{n,m}(t)}{dt} = f_{n+1,m}(t) + f_{n-1,m}(t) + f_{n,m+1}(t) + f_{n,m-1}(t) + [F(n+m) + \delta_{n,m} U] f_{n,m}(t), \quad (2)$$

where we used units of $\hbar = W = e = a = 1$. The on-site energies ϵ_n were taken as the reference energy ($\epsilon_n = 0$) without any loss of generality. The above set of equations were solved numerically by using a recursive high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator $[V(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} (-iH\Delta t)^l / l!]$ where H is the Hamiltonian. The wave-function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. The following results were taken by using $\Delta t = 0.05$ and the sum was truncated at $n_0 = 20$. This cutoff was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered.

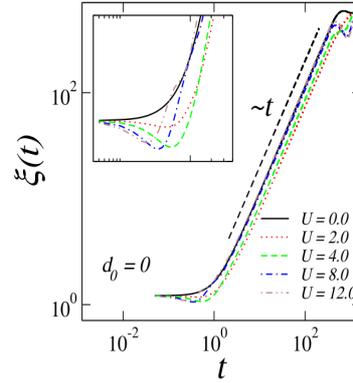


Fig. 1. The time dependent spatial extension ξ versus time t . Calculations were done using $N = 1500$, $U = 0$ up to 12, $\sigma = 1$ and $d_0 = 0$. After an initial transient, ξ diverges linearly $\xi \propto t$ even in the regime of strong interaction. In the transient period (inset), the spatial extension depicts a small decrease due to the electron–electron coupling.

2. Results

2.1. Unbiased dynamics ($F = 0$)

We firstly investigate the two-electrons wave-packet dynamics in the absence of an electric field ($F = 0$). Specifically, we followed the time-evolution of an initially Gaussian wave-packet with width σ :

$$\langle ns_1, ms_2 | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp[-(n-n^0)^2/4\sigma^2] \times \exp[-(m-m^0)^2/4\sigma^2] \quad (3)$$

and computed the participation function $P(t)$ and the spacial extension $\xi(t)$ defined as [17]

$$P(t) = \frac{1}{\sum_{n,m} |f_{n,m}(t)|^4}, \quad (4)$$

and

$$\xi(t) = \sum_{n,m} \sqrt{[(n-\langle n \rangle(t))^2 + (m-\langle m \rangle(t))^2]} |f_{n,m}(t)|^2, \quad (5)$$

where $\langle n \rangle(t)$ and $\langle m \rangle(t)$ are the average position of each electron at time t . The initial position of the electrons (n^0, m^0) will be considered to be $(N/2 - d_0, N/2 + d_0)$. The participation function $P(t)$ varies from 1, corresponding to states with each electron fully localized in a given pair of sites (n, m) , to N^2 when both electrons are uniformly distributed along the chain [17]. This function gives information about the product of the number of sites that are visited by each electron during the time evolution of the wave-packet over the underlying lattice. The spacial extension $\xi(t)$ measures the wave-function width on the $n \times m$ plane. In Fig. 1, we show results for the spatial extension ξ versus time t using a chain with $N = 1500$ sites, $U = 0$ up to 12 and $d_0 = 0$. After the initial transient, ξ diverges linearly $\xi \propto t$ even for strongly interacting electrons, thus indicating a ballistic spread of the two-electrons wave-packet. One also notices a dip in the spatial extension in the short time region for the case of interacting electrons. Such decreasing induced by the electron–electron interaction is related to the presence of bounded eigenstates in the initial wave-packet. Fig. 2(a) shows the participation number $P(t)$ versus time t computed using the same parameters as in Fig. 1. In the absence of electron–electron interaction ($U = 0$), the participation number grows as $P(t) \propto t^2$, signaling that the electrons spread uniformly and independently over the chain, in agreement with the time dependent behavior of the electronic participation number in 1D crystal lattices. However, when

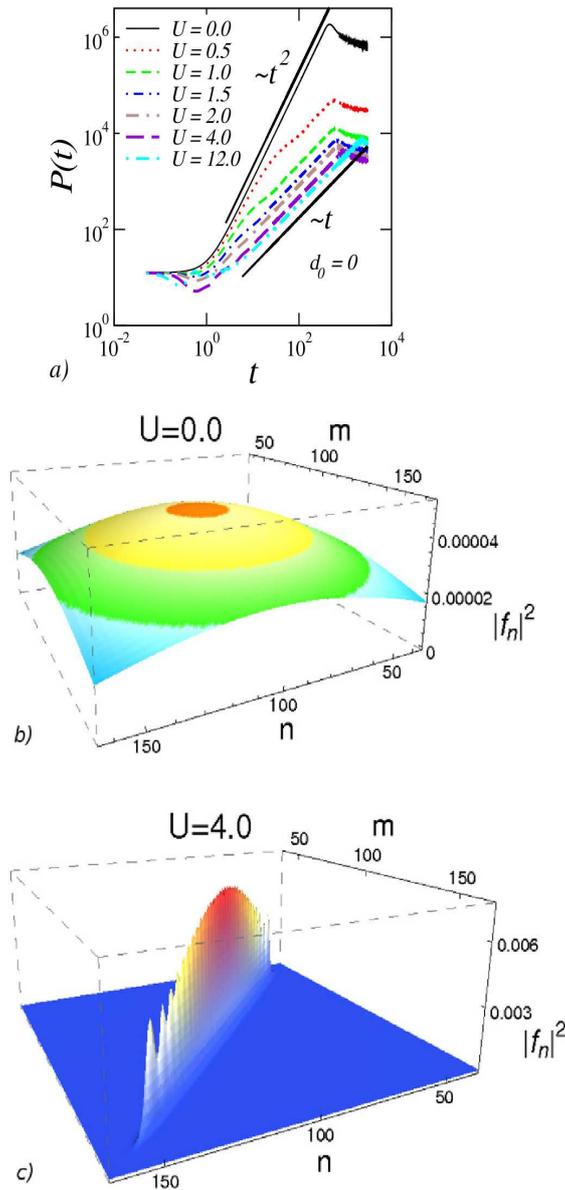


Fig. 2. (a) Participation number $P(t)$ versus time t computed using $N = 1500$, $U = 0$ up to 12 and $d_0 = 0$. In the absence of interaction ($U = 0$) the participation number displays a ballistic growth ($P(t) \propto t^2$). With the electron–electron coupling turned on, a crossover to an unusual dynamical behavior is observed ($P(t) \propto t$). (b–c) The two-electron wave function after a long evolution time. Here, we used $N = 200$, $d_0 = 0$, (b) $U = 0$ and (c) $U = 4$. In the absence of electron–electron coupling, both electrons spread ballistically filling the $n \times m$ plane. For $U > 0$, due to the appearance of bounded states within the energy band, the electrons spread become correlated and the wave packet concentrates around the diagonal $n = m$.

the electron–electron coupling is turned on, we obtain a slower divergence of the participation number, in the form ($P(t) \propto t$). In Fig. 2(b–c) we illustrate more clearly the time-evolution of both electrons through the lattice. These calculations were performed using $N = 200$, $d_0 = 0$, (b) $U = 0$ and (c) $U = 4$. In the absence of electron–electron interaction both electrons spread ballistically and independently, with the two-particles wave-packet filling isotropically the $n \times m$ plane. For $U > 0$, due to the appearance of bounded states within the energy band, the electrons spread become correlated and the wave packet concentrates around the $n = m$ region. These features also leave signatures in the one-electron wave-function $|f_n|^2 = \sum_m |f_{n,m}|^2$ (see Fig. 3). This figure shows snapshots of the wave-packet starting from the initial transient regime

($t = 5$) until longer time evolution periods ($t = 20, 40, 100$) for $U = 0, 4$, and 12. In the absence of electron–electron interaction, the wave-packet spreads ballistically displaying a single peak structure. In the presence of electron–electron interaction, the wave-packet develops two main structures. One of them is concentrated at the electron initial position. The other component has a strong amplitude at the wave front that resembles the wave packet spread of a single non-interacting electron initially localized at the chain center [20,21]. Both structures evolve ballistically.

2.2. Biased dynamics ($F \neq 0$)

Now, we consider the wave-packet dynamics of both electrons subjected to a uniform electric field ($F \neq 0$). It is well known that in disorder-free systems, a uniform electric field causes the dynamic localization of the one-electron and gives rise to an oscillatory motion of the wave-packet, the so-called Bloch oscillations [17,22]. Once Eq. (2) is solved for the initial condition (3), we compute the mean position of a given electron $\langle n \rangle(t)$

$$\langle n \rangle(t) = \sum_{n,m} n |f_{n,m}(t)|^2. \quad (6)$$

In Ref. [17] it was shown that the centroid of the two-electron wave-packet displays an oscillatory pattern with a predominant frequency close to $\omega = 2F$. This phenomenon was related to the emergence of bounded states with the electrons oscillating coherently with an effective charge $2e$ [17]. For much stronger interactions, the $\omega = F$ frequency is re-amplified. Here we analyse in detail the effect of Hubbard interaction on this unusual Bloch oscillation. We will explore the role played by bounded states on the amplitude of the wave-packet oscillation and also on the intensity of the doubled frequency mode. We numerically determine in Fig. 4 the average displacement of one electron from its average position as a function of the Hubbard coupling. Firstly, we analyzed the particular case on which both electrons are initially fully localized ($\sigma = 0$). In this case, no Bloch oscillation is observed for non-interacting electrons. As the interaction is turned on, the oscillation amplitude depicts a maximum at a finite interaction strength (of the order of $U = 4$), with the oscillation amplitude vanishing in the regime of strong couplings. Whenever the initial wave-packet has a finite width σ , a quite distinct picture emerges. At $U = 0$, the centroid oscillates with a relatively large amplitude. The oscillation amplitude initially decreases when increasing U , but slowly return to increase in the regime of strong couplings. Also, the asymptotic amplitude increases with the width of the initial wave-packet. All these features can be qualitatively understood by stressing that the initial wave-packet can be splitted in two components composed of bounded and unbounded states. The band of bounded states is centered around $E = 0$, while the band of bounded states ranges from $U < E < \sqrt{16 + U^2}$ [14]. The Bloch oscillation due to the unbounded component has a larger amplitude than that due to the bounded states, according to the semi classical argument that predicts the oscillation amplitude to be directly proportional to the bandwidth and inversely proportional to the effective charge. Also, the relative role of these two components depends on the width of the initial wave-packet, with a larger contribution of unbounded states being present at larger values of σ . Further, the initial Gaussian wave-packet (Eq. (3)) has a spectral density centered at $E = 0$. As the coupling strength starts to increase, there is an increasing role played by the bounded component, which leads to the decrease of the oscillation amplitude. At very large couplings, the re-amplification of the $\omega = F$ oscillation mode as well as of the oscillation amplitude are related to the large displacement of the band of bounded states from the spectral distribution of the initial wave-packet.

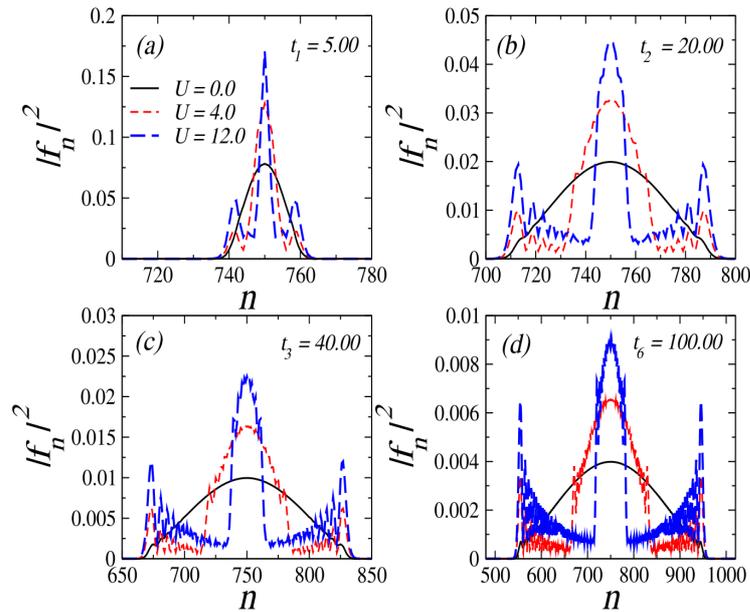


Fig. 3. The one-electron wave-function $|f_n|^2 = \sum_m |f_{n,m}|^2$ for times $t = 5, 20, 40, 100$, $N = 1500$ sites, $\sigma = 1$ and $U = 0, 4, 10$. In the absence of electron–electron interaction, the wave-packet spreads ballistically displaying a single peak structure. Two main structures develops in the presence of electron–electron interaction. One of them is concentrated at the electron initial position while the other has a strong amplitude at the wave front. Both structures evolve ballistically.

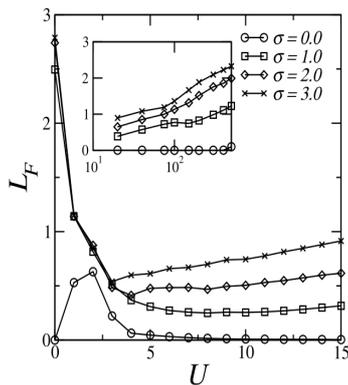


Fig. 4. The amplitude of the Bloch oscillation L_F versus the strength of the Hubbard interaction U for several initial wave-packet widths $\sigma = 0, 1, 2, 3$ and $F = 0.5$. For $\sigma = 0$, L_F vanishes for non-interacting electrons. As the interaction is turned on, the oscillation amplitude depicts a maximum at a finite interaction strength (of the order of $U = 2$), with the oscillation amplitude vanishing in the regime of strong couplings. For a finite width σ , the centroid oscillates with a relatively large amplitude at $U = 0$. The oscillation amplitude initially decreases when increasing U , but slowly returns to increase in the regime of strong coupling (inset).

Before concluding, we provide additional evidence of the influence of bounded states in the frequency doubling phenomenology. We consider now the time-evolution of an initially Gaussian wave-packet with a finite initial velocity given by

$$\begin{aligned} \langle ns_1, ms_2 | \Phi(t=0) \rangle &= \frac{1}{A(\sigma)} \exp[ik(n+m)] \\ &\times \exp[-(n-n^0)^2/4\sigma^2] \\ &\times \exp[-(m-m^0)^2/4\sigma^2] \end{aligned} \quad (7)$$

where i is the imaginary unit. The phase factor $\exp[ik(n+m)]$ governs the initial velocity of the wave-packet (in the particular case of identical velocities of both electrons). It also can be used to displace the spectral density of the wave-packet away from the band center. In Fig. 5, we compute the mean position $\langle n \rangle(t)$ versus time t using a chain with $N = 100$ sites, $d_0 = 0$ (initially close electrons),

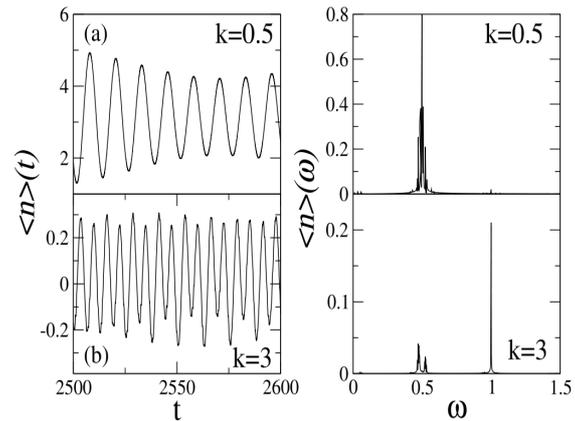


Fig. 5. Data for the mean position $\langle n \rangle(t)$ versus time t using a chain with $N = 100$ sites, $d_0 = 0$ (initially close electrons), $F = 0.5$, $U = 8$, $\sigma = 1$ and (a) $k = 0.5$ and (b) $k = 3$. For small k , the re-amplification of the mode with frequency $\omega = F$ is seen in this strong coupling regime. For $k = 3$ the frequency doubling persists.

$F = 0.5$, $U = 8$, (a) $k = 0.5$ and (b) $k = 3$. For small k , we recover the previous result showed above, the re-amplification of the mode with frequency $\omega = F$. This is in agreement with the general scenario described above because the band of bounded states is far from the band center around which the wave-packet spectral density is just slightly displaced. However, for $k = 3$ we obtain an oscillatory pattern with a predominant frequency close to $\omega = 2F$. It is important to stress that, in this case of large k , the frequency doubling persists even in the strong interaction regime for which this phenomenon is suppressed at low k . In fact, the initial state defined in Eq. (7) for $k = 3$ has a spectral decomposition which is quite displaced from the band center and exhibits a significant superposition with the band of bounded states. This feature promotes the emergence of coherent hoppings and the consequent frequency doubling of the Bloch oscillations.

3. Summary and conclusions

In summary, we studied the one-dimensional dynamics of two interacting electrons with opposite spins under the influence of a

static uniform electrical field F . Starting from an initial Gaussian wave-packet and keeping the electric field turned off, we showed a non-trivial dynamics of two-electrons wave-packet width and participation number. The time-evolution of wave-packet width is always ballistic, irrespective to the strength of the electron–electron interaction. However, the dynamics of the participation number of the two-electrons wave-packet displays a crossover from a ballistic-like growth ($P(t) \propto t^2$) for non-interacting electrons to a diffusive-like growth ($P(t) \propto t$) whenever the electron–electron coupling is turned on. Such crossover is related to the emergence of two-electrons bounded states that correlates the dynamics of the electronic wave-packet. The presence of an electron–electron coupling also imprints its signature in the one-electron wave-packet. In the regime of non-interacting electrons, an initially Gaussian one-electron wave-packet evolves ballistically displaying a single peak structure. The presence of an electron–electron coupling is reflected by the development of a doubled structure with the electronic density concentrated at the initial position as well as at the wave fronts.

In addition, the electric-field biased wave-packet dynamics was revisited. We numerically showed that the length of the segment over which the centroid of the electron wave-packet oscillates displays distinct features for delta-like and Gaussian initial wave-packets. In the case of delta-like initial wave-packets, the oscillation amplitude exhibits a maximum at a finite interaction strength and vanishes in both limits of $U \rightarrow 0$ and $U \rightarrow \infty$. The vanishing of the oscillation amplitude in these limits is in agreement with previous results that showed no Bloch oscillation for delta-like wave-packets of non-interacting electrons [20,21]. On the other hand, a reversed trend is found for initially Gaussian wave-packets. A finite oscillation amplitude in the regimes of weak and strong interaction is typical of non-interacting electrons with an initial Gaussian wave-packet distribution. The oscillation amplitude displays a minimum at a finite interaction strength where the band of bounded two-electron states plays a significant role in the wave-packet dynamics. Such reduced oscillation amplitude is related to the reduced width of the bounded states band and to the correlated dynamics of the two-electrons. In the intermediate coupling strength regime, the predominant role played by bounded states in the Bloch oscillations is supported by the emergence of a frequency doubled component in the spectral decomposition of the wave-packet centroid. We further showed that a re-amplification of the doubled frequency mode can be achieved in the regime of strong couplings by tuning the overall wave-vector of the initial

two-electrons wave-packet in order to promote a stronger superposition between the wave-packet spectral distribution and the band of bounded states. The above features reveal that even a short-ranged electron–electron interaction has a strong influence on the field driven Bloch oscillations. It would be much valuable to extend the present analysis to the case of interacting many electron systems. We hope the present work can stimulate future developments along this line.

Acknowledgements

This work was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES and FINEP, Rede Nanobioestruturas, as well as by the Alagoas State research agency FAPEAL. We are grateful to H.N. Nazareno for useful discussions.

References

- [1] E.H. Lieb, W. Liniger, Phys. Rev. 130 (1963) 1605; E.H. Lieb, Phys. Rev. 130 (1963) 1616.
- [2] M. Girardeau, J. Math. Phys. 1 (1960) 516.
- [3] M. Flicker, E.H. Lieb, Phys. Rev. 161 (1967) 179; E.H. Lieb, F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 1445; C.N. Yang, Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 1312; B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 98.
- [4] T.C. Choy, Phys. Lett. A 80 (1980) 49.
- [5] Z. Maassarani, Phys. Lett. A 239 (1998) 187.
- [6] M.L. Lyra, M.D. Coutinho-Filho, A.M. Nemirovsky, Phys. Rev. B 48 (1993) 3755.
- [7] H. Tasakiy, J. Phys.: Condens. Matter 10 (1998) 4353.
- [8] D.C. Mattis, M. Dzierzawa, X. Zotos, Phys. Rev. B 42 (1990) 6787.
- [9] K. Held, G. Keller, V. Eyert, D. Vollhardt, V.I. Anisimov, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 5345.
- [10] M. Potthoff, W. Nolting, Phys. Rev. B 59 (1999) 2549.
- [11] R.R. Montenegro-Filho, M.D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. B 78 (2008) 014418.
- [12] R.R. Montenegro-Filho, M.D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. B 74 (2006) 125117.
- [13] Carlindo Vitoriano, M.D. Coutinho, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 146404.
- [14] F. Claro, J.F. Weisz, S. Curilef, Phys. Rev. B. 67 (2003) 193101.
- [15] J.K. Freericks, V.M. Turkowski, V. Zlatić, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 266408.
- [16] X.L. Gao, M. Polini, M.P. Tosi, V.L. Campo, K. Capelle, M. Rigol, Phys. Rev. B 73 (2006) 165120.
- [17] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, Phys. Rev. B 76 (2007) 155124.
- [18] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, Phys. Rev. B 81 (2010) 045116.
- [19] P.E. de Brito, E.S. Rodrigues, H.N. Nazareno, Physica B 388 (2007) 393.
- [20] S.N. Evangelou, Shi-Jie Xiong, E.N. Economou, Phys. Rev. B 54 (1996) 8469.
- [21] S.N. Evangelou, D.E. Katsanos, Phys. Rev. B 56 (1997) 12797.
- [22] F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 197402.

Anexo **D**

Artigo: Dois elétrons interagentes em cadeias com desordem correlacionada

Dynamics of two interacting electrons in Anderson-Hubbard chains with long-range correlated disorder: Effect of a static electric field

W. S. Dias, E. M. Nascimento, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura
Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió, AL, Brazil

(Received 19 November 2009; published 13 January 2010)

We investigate the influence of the on-site Hubbard interaction U on the eigenstates and dynamics of two electrons restricted to move in a linear chain with long-range correlated disorder. We solve the time-dependent Schrödinger equation to follow the time evolution of an initially localized Gaussian two-electron wave packet. In the regime of strongly correlated disorder, for which one-electron extended eigenstates emerge near the band center, the electron-electron coupling promotes the trapping of a finite portion of the wave packet. In the presence of a uniform electric field, the wave packet develops complex Bloch oscillations. The power spectrum of the centroid's velocity trace shows a splitting near the typical semiclassical Bloch frequency, as well as a frequency doubling phenomenon for intermediate couplings which is related to the bounded states components that are present in the wave packet. Finally, we show that localized and extended two-electron eigenstates coexist near the band center with the level spacing distribution showing a universal Poissonian form irrespective to the Hubbard coupling.

DOI: [10.1103/PhysRevB.81.045116](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.045116)

PACS number(s): 71.10.Li, 73.20.At, 71.20.-b, 05.60.Gg

I. INTRODUCTION

The time evolution of one-electron wave packets in low-dimensional disordered systems is a well-known problem with several connections with transport phenomena.¹ For low-dimensional systems with uncorrelated disorder, the Anderson localization theory predicts the absence of extended eigenstates.¹⁻³ This means that the width of the time-dependent wave packet saturates in the long-time limit, i.e., the electron remains localized in a finite region around the initial position. The presence of short- or long-range correlations in the disorder distribution is a key mechanism to induce extended states in the one-dimensional (1D) Anderson model.⁴⁻¹⁰ In fact, it has been established that short-range correlated on-site disorder may lead to the appearance of extended states at special resonance energies.⁴⁻⁶ However, these states form a set of null measure of the density of states in the thermodynamic limit, which implies in the absence of mobility edges in such models.

On the other hand, long-range correlations can induce a metal-insulator transition in 1D systems.⁸⁻¹⁰ A strategy to achieve this is to consider a 1D system with nearest-neighbor hopping integrals and a long-range correlated on-site disorder distribution with a powerlike spectrum behaving as $k^{-\alpha}$. Whenever the standard deviation of the energy distribution is equal to the nearest-neighbor hopping and $\alpha < 2$, all states remain localized and the Lyapunov exponent is finite on the entire energy band. For $\alpha > 2$, a phase of extended states appears at the center of the energy band, giving rise to two mobility edges. After this finding, models with long-range correlated on-site disorder distributions have attracted much attention. Scaling properties of the localization length¹¹ and local density of states¹² close to the critical point have been subjects of recent studies. Further, the metal-insulator transition in the two-dimensional Anderson model with long-range correlations was characterized by measuring the participation number exponent from the long-time behavior of the wavefunction spacial distribution.¹³ The theoretical prediction of

delocalization induced by correlated disorder has been confirmed by experimental works in semiconductor superlattices¹⁴ and microwave transmission spectra through a single-mode waveguide with correlated scatterers.¹⁵ Several works suggest that an appropriate algorithm for generating random correlated sequences with desired mobility edges could be used in the manufacture of filters for electronic or optical signals.⁹

A key problem in condensed-matter physics is to understand the electronic transport when disorder, interaction, and electric field effects are simultaneously present. The interplay between disorder and dynamical localization due to an electric field was recently studied in Refs. 16 and 17. It was numerically shown that coherent Bloch oscillations can appear whenever the disorder distribution displays appropriated long-range correlations in both one-dimensional¹⁶ and two-dimensional¹⁷ systems. The problem involving disorder and electron-electron interaction has been a subject of great interest due to their competitive roles.¹⁸⁻³¹ It has been shown that an on-site Hubbard interaction weakens the Anderson localization induced by disorder. Shepelyansky¹⁸ pioneered the study of two interacting electrons moving in a disordered 1D system and obtained an enhanced propagation effect of an interacting electron pair over distances larger than the single-particle localization length, as indeed predicted in disordered mesoscopic rings threaded by a magnetic flux.²⁰ Recently, the interplay between dynamical localization and electron-electron interaction was reported in Refs. 32-35. By using numerical and analytical calculations, the problem involving N interacting electrons moving along a chain and subject to an external electric field was studied in Ref. 32. It was shown that the N -particle problem is identical to that of a single-particle moving in an N -dimensional lattice, with defect surfaces dividing the space in symmetric domains. It was shown that in the limit of a weak hopping integral, the electron-electron interaction induces an additional oscillation of the eigenstates drift velocity. The period of this oscillation was found to be determined solely by the range and strength

DIAS *et al.*PHYSICAL REVIEW B **81**, 045116 (2010)

of the electron-electron interaction.³² By using an extended dynamical mean-field theory,³⁴ the effect of a large electric field on interacting electrons was studied, numerically demonstrating that the Bloch oscillations decay due to electron correlations.

In this work, we provide a detailed analysis of the interplay between electron-electron interaction, correlated disorder, and an external field using a prototype one-dimensional tight-binding Anderson-Hubbard Hamiltonian to describe a two-electron system. To this end, we focus on the electric field biased wave-packet dynamics of two interacting electrons moving in a 1D chain with long-range correlated disorder. We build a disordered long-range correlated on-site energy distribution using the formalism introduced in Refs. 8 and 10 which generates a random sequence with power spectrum proportional to $1/k^\alpha$, where k is the wave vector of the modulations on the random sequence landscape. We will use numerical methods to solve the Schrödinger equation and compute the stationary eigenstates and the time evolution of the two-electron wave packet. Starting from an initial Gaussian wave packet, we will be mainly interested in revealing the hole played by the bounded two-electron states generated by the Hubbard-type coupling in the biased and unbiased wave-packet dynamics, particularly in the regime of strongly correlated disorder for which a band of extended states is expected to emerge. Finally, we will also compute the level spacing distribution and discuss its dependence on the electron-electron coupling under the light of the usual random matrix results for disordered one-electron systems.

II. MODEL AND FORMALISM

The Anderson-Hubbard tight-binding Hamiltonian for two interacting electrons moving in a 1D system with correlated disorder in the presence of a static uniform electric field F is given by^{30,31}

$$H = \sum_n \sum_s W(c_{n+1,s}^\dagger c_{n,s} + c_{n,s}^\dagger c_{n+1,s}) + \sum_n \sum_s [\epsilon_n + eFan] c_{n,s}^\dagger c_{n,s} + \sum_n U c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}, \quad (1)$$

where $c_{n,s}$ and $c_{n,s}^\dagger$ are the annihilation and creation operators for the electron at site n with spin s , \mathbf{n} is the position operator, W is the hopping amplitude, U is the on-site Hubbard electron-electron interaction, and e is the electron charge. In order to introduce long-range correlations in the disorder distribution, the sequence of site energies obeys the relation^{8,10}

$$\epsilon_n = \zeta(\alpha, N) \sum_{k=1}^{N/2} \left(\frac{1}{k}\right)^{\alpha/2} \cos\left(\frac{2\pi mk}{N} + \phi_k\right), \quad (2)$$

where $\{\phi_k\}$ are $N/2$ independent random phases uniformly distributed in the interval $[0, 2\pi]$. This energy sequence is shifted in order to have $\langle \epsilon_n \rangle = 0$. $\zeta(\alpha, N)$ is used to set the energy sequence variance $\Delta \epsilon_n = 1$ for all system sizes. The parameter α controls the degree of correlations. In the absence of an external field and in the limit of noninteracting

electrons, this model presents a band of extended states for $\alpha > 2$.⁸

A. Time-dependent Schrödinger equation analysis

In order to follow the time evolution of two-electron wave packets, we solve the time-dependent Schrödinger equation by expanding the wave function in the Wannier representation

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2}(t) |n_1 s_1, n_2 s_2\rangle, \quad (3)$$

where the ket $|n_1 s_1, n_2 s_2\rangle$ represents a state with one electron with spin s_1 at site n_1 and the other electron with spin s_2 at site n_2 . To allow for double occupancy of the on-site orbitals, we will consider in the following that the electrons are in distinct spin states (singlet state). Once the initial state is prepared as a direct product of states, the electrons will always be distinguishable by their spins since the Hamiltonian does not involve spin-exchange interactions. The time evolution of the wave function in the Wannier representation becomes

$$i \frac{df_{n_1, n_2}(t)}{dt} = f_{n_1+1, n_2}(t) + f_{n_1-1, n_2}(t) + f_{n_1, n_2+1}(t) + f_{n_1, n_2-1}(t) + [\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + F(n_1 + n_2) + \delta_{n_1, n_2} U] f_{n_1, n_2}(t), \quad (4)$$

where we used units of $\hbar = W = e = a = 1$. The above set of equations was solved numerically using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator $A(\Delta t)$,

$$A(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}, \quad (5)$$

where H is the Hamiltonian. The wave function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = A(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. The method can be used recursively to obtain the wave function at time t . The following results were taken by using $\Delta t = 0.05$ and the sum was truncated at $n_o = 20$. This cutoff was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered. We followed the time evolution of an initially Gaussian wave packet of width σ ,

$$\langle n_1 s_1, n_2 s_2 | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp[-(n_1 - n_1^0)^2 / 4\sigma^2] \times \exp[-(n_2 - n_2^0)^2 / 4\sigma^2]. \quad (6)$$

Once Eq. (4) is solved for the initial condition (6), we compute the average centroid's position $X(t)$ and velocity $V(t)$ defined as

$$X(t) = \frac{1}{2} [\langle n_1 \rangle(t) + \langle n_2 \rangle(t)],$$

$$V(t) = -2 \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} [f_{n_1+1, n_2}^* + f_{n_1, n_2+1}^*], \quad (7)$$

where

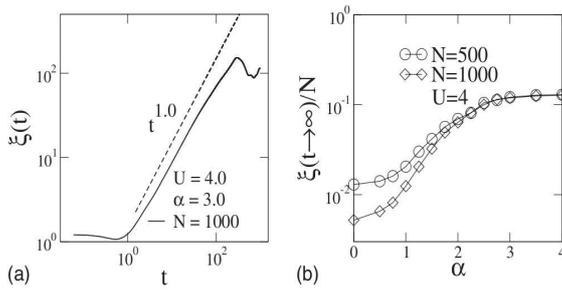


FIG. 1. (a) Spatial extension versus time for $\alpha=3$, $N=1000$ sites, and $U=4$. (b) Scaled long-time spatial extension $\xi(t \rightarrow \infty)/N$ versus the correlation controlling parameter α . Clear signatures of extended states are found at the strong correlation limit ($\alpha > 2$) (ballistic spread followed by a plateau with $\xi \propto N$).

$$\langle n_i \rangle(t) = \sum_{n_1, n_2} \langle n_i \rangle |f_{n_1, n_2}(t)|^2, \quad i = 1, 2. \quad (8)$$

In addition, to characterize the spacial extension of the two-electron wave packet, we rely on the spacial extension $\xi(t)$ defined as^{36,37}

$$\xi(t) = \sum_{n_1, n_2} \sqrt{[n_1(t) - n_1^0]^2 + [n_2(t) - n_2^0]^2} |f_{n_1, n_2}(t)|^2. \quad (9)$$

The initial position of the electrons (n_1^0, n_2^0) will be considered to be $(L/2 - d_0, L/2 + d_0)$. The spacial extension $\xi(t)$ is equal to 0 for states with both electrons localized in a single site. It becomes proportional to N when both electrons are uniformly distributed along the chain.^{36,37} This function measures the wave function spread on the $n_1 \times n_2$ plane. The correlated nature of the two-electron dynamics can be numerically probed by computing the two-point correlation function written as

$$\zeta = \langle n_1 n_2 \rangle - \langle n_1 \rangle \langle n_2 \rangle, \quad (10)$$

where $\langle n_1 \rangle$ and $\langle n_2 \rangle$ are the electrons average positions given by Eq. (8) and

$$\langle n_1 n_2 \rangle = \sum_{n_1, n_2} n_1 \cdot n_2 |f_{n_1, n_2}|^2. \quad (11)$$

Further, we analyze the amplitude of the wave function at the initial site, calculating the so-called return probability,^{13,38}

$$R(t) \equiv |f_{n_1^0, n_2^0}(t)|^2. \quad (12)$$

The electrons escaping from their initial positions occur when the return probability $R(t \rightarrow \infty)$ becomes as small as $1/N^2$ as t evolves. Conversely, the return probability saturates at a much larger value for localized as well as for partially trapped wave packets.

In the case of noninteracting electrons, a band of extended states emerges in the strong correlated regime ($\alpha > 2$). In Fig. 1(a) we show data of the spacial extension ξ versus time for $\alpha=3$ and interacting electrons. Calculations were done by solving the two electrons time-dependent Schrödinger equation for $N=1000$ sites with Hubbard interaction $U=4$. Within our numerical precision, ξ shows an initial ballistic electronic spread followed by a plateau that signals the arrival of the

wave packet at the chain borders. In Fig. 1(b), we compute the scaled long-time spacial extension $\xi(t \rightarrow \infty)/N$ versus the correlation parameter α . In this case, we numerically integrate the wave equation until a stationary state can be reached. In the presence of extended states, $\xi(t \rightarrow \infty)$ saturates at a value proportional to N due to the multiple reflections of the wave packet at the chain boundaries. On the other hand, it shall display a slower finite-size scaling when the wave packet is localized on a finite segment of the chain. In agreement with the one-electron case, the collapse of data for $\alpha > 2$ signals the emergence of extended two-electron eigenstates.

To analyze the main effect caused by the electron-electron interaction in the two-electron wave-packet dynamics, we concentrate our attention to the regime of strongly correlated disorder $\alpha > 2$ for which the wave packet spreads over the entire chain in the absence of the electron-electron interaction. In Fig. 2, we report the time evolution of the one-electron wave-packet profile ($|f_n(t)|^2 = \sum_m |f_{n,m}(t)|^2$) computed using $N=1000$, $\alpha=3$, $d_0=0$, $F=0$, (a) $U=0$, (b) $U=4$, and (c) $U=30$. One clearly sees that a finite fraction of the wave packet becomes trapped at the initial position when the Hubbard coupling increases. A more quantitative description is shown in Fig. 3 where the long-time return probability $R(t \rightarrow \infty)$ [Fig. 3(a)] and the long-time electron-electron correlation function $\zeta(t \rightarrow \infty)$ [Fig. 3(b)] are plotted in terms of the Hubbard interaction U . Both quantities increase as the interaction is increased implying in a correlated distribution of the two-electron wave packet. In particular, the long-time correlation function increases linearly in the regime of weak coupling [see inset of Fig. 3(b)]. These results are consistent with the predominant role played by the two-electron bounded states in the regime of strongly correlated electrons.

An uniform external field applied along the chain length promotes the localization of the electronic wave packet. In uncorrelated disordered systems, this localization results in incoherent oscillations of the wave packet around its initial position, with an amplitude that decreases with the field strength. In the absence of disorder, these oscillations become coherent, usually termed as Bloch oscillations. Within a semiclassical approach, the typical frequency of the Bloch oscillations is proportional to the field strength and inversely proportional to the energy bandwidth. It has been shown that the introduction of long-range correlations in the disorder distribution leads to the emergence of a band of extended states⁸ and that the one-electron wave packet displays coherent oscillations in the presence of an external field whose amplitude is proportional to the width of the band of extended states.¹⁶ The build up of coherent oscillations for the case of a two-electron wave packet can be illustrated by phase-space plots of the center-of-mass velocity and position of the two-electron wave packet ($X \times V$), as shown in Fig. 4. Calculations were performed using $N=500$ sites, $U=0.0$ and the initial location of the wave packet $(n_0, m_0) = (N/2, N/2)$. Two representative cases are illustrated: (a) $\alpha=0$ and (b) $\alpha=3$. For both cases, the integration time used was $t=1000$. In Fig. 4(a) one has the typical incoherent oscillations of the electrons wave packet, as expected for uncorrelated disordered systems, reflecting the absence of a typical frequency on the centroid dynamics (see Ref. 16). In Fig. 4(b), the

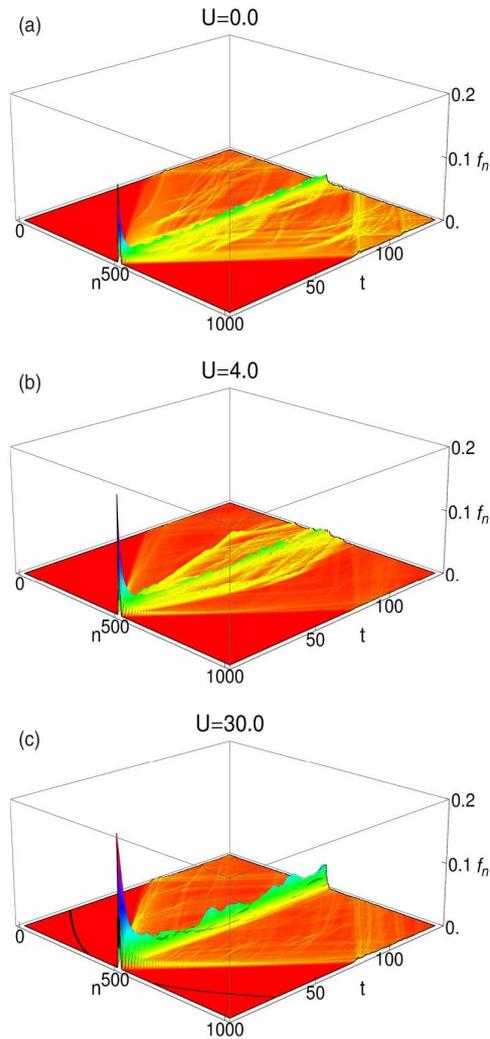
DIAS *et al.*PHYSICAL REVIEW B **81**, 045116 (2010)

FIG. 2. (Color online) Time evolution of the one-electron wave function $|f_n(t)|^2 = \sum_m |f_{n,m}(t)|^2$ versus t and n computed using $N=1000$, $d_0=0$, $F=0$, $\alpha=3$, (a) $U=0$, (b) $U=4$, and (c) $U=30$. For $U>0$ a finite fraction of the wave packet remains trapped on the initial site.

phase-space diagram shows coherent oscillations with a slowly varying amplitude. This is a clean signature of Bloch oscillations which are associated with the emergence of ex-

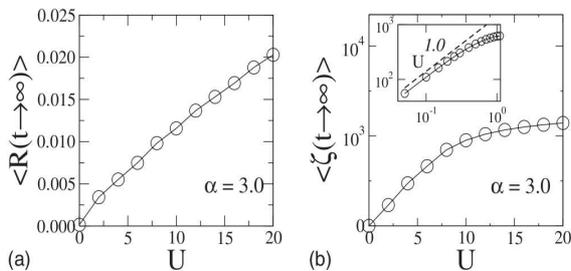


FIG. 3. (a) The long-time return probability $R(t \rightarrow \infty)$ and (b) the long-time correlation function $\zeta(t \rightarrow \infty)$ versus the Hubbard interaction U . The coupling correlates the two electrons and traps a finite portion of the wave packet.

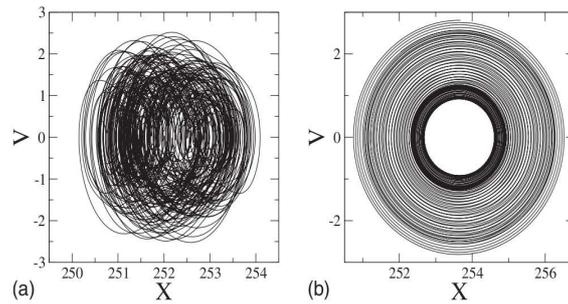


FIG. 4. Phase portraits of the centroid's velocity vs position for $N=500$ sites, $U=0.0$, $F=0.5$, and the initial location of the wave packet $(n_0, m_0) = (N/2, N/2)$. (a) $\alpha=0$, showing incoherent oscillations. (b) $\alpha=3$, with coherent orbits in phase space indicating Bloch-type oscillations.

tended states in this strongly correlated regime.^{16,39} When the Hubbard coupling is finite, both centroid and velocity display amplitude-modulated envelopes and multifrequency patterns. In Fig. 5, we display the time evolution of the centroid's velocity computed using $N=500$ sites, $\alpha=3$, and $U=4.0$. The two-electron wave packet reveals a complex oscillatory amplitude-modulated pattern. Its Fourier transform $V(\omega)$ displays a predominant narrow peak close to $\omega=2F$. The modulation in the oscillation pattern observed at finite U is mainly related to the small splitting of the peak at $\omega=F$. Such splitting is on the order of Δ^2/U for large U , where Δ is the width of two-electron crystalline band. It is due to the electron-electron interaction which is also responsible for the emergence of an additional oscillation frequency of the drift velocity of bounded eigenstates.³² The frequency doubling phenomena observed in Fig. 5(b) were established in Ref. 36 for two electrons moving in a 1D pure chain. As the interaction is turned on, the emergence of bounded states correlates the electrons motion.

B. Eigenstates

The numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation has shown several signatures of delo-

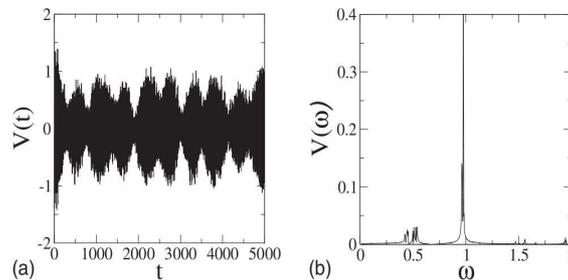


FIG. 5. (a) Time evolution of the centroid's velocity computed using $N=500$ sites, $\alpha=3$, $F=0.5$, and $U=4.0$. (b) The Fourier spectrum of the velocity. The spectrum exhibits a splitting of the peak at the usual frequency of the one-electron Bloch oscillation $\omega=F$. Such intermediate Hubbard interaction give rises to an oscillatory pattern with a predominant frequency close to $\omega=2F$ due to the correlated motion of the electrons.

045116-4

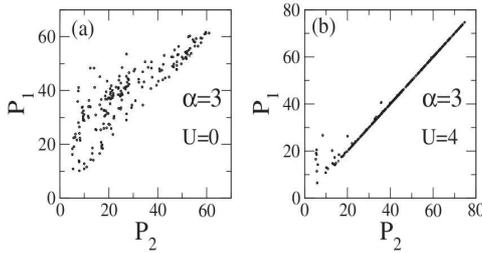


FIG. 6. Participation number associated with each electron $P_1 \times P_2$ for all energy eigenstates near the band center. (a) Without Hubbard coupling: there are two-electron eigenstates for which the electrons have quite distinct participation numbers. (b) For $U=4$: both electrons show approximately the same participation number, except the most localized ones.

calized eigenstates in the long-range correlated 1D model with interacting electrons. In this section, we will apply an exact diagonalization procedure to further explore the particularities of these extended eigenstates. We start by diagonalizing Hamiltonian (1) at zero field and computing the participation number associated with each electron. In our calculations, we followed the usual definition of the participation number^{37,40} [$P(E) = 1/(\sum_{n_1, n_2} |f_{n_1, n_2}(E)|^4)$] to define the participation number associated to each electron P_i ,

$$P_i(E) = \frac{1}{\sum_{n_i=1}^N |f_{n_i}(E)|^4}, \quad (13)$$

where $|f_{n_i}(E)|^2 = \sum_{n_j} |f_{n_i, n_j}(E)|^2$ is the probability density for a single electron. In general lines, $P_i(E)$ measures the number of sites on which the i th electron is spread in the eigenvector of energy E . In Fig. 6, we show data of P_1 versus P_2 of all states near the band center ($|E| < 0.5$) using $N=120$ sites, $\alpha=3$, (a) $U=0$ and (b) $U=4$. We have labeled the electrons in such a way to have $P_1 > P_2$ for all states, i.e., electron in Eq. (1) was chosen to be the most extended one. It is important to call attention to the fact that extended and localized one-electron eigenstates can coexist within the same energy range. In the case without interaction [Fig. 6(a)], we can even have one electron extended and the other one localized, i.e., $P_1 \gg P_2$ for a given eigenstate. The eigenstates are degenerated and composed of the direct product of one-electron states ($|\phi_{1,2}(E)\rangle = |\phi_1(E_1)\rangle |\phi_2(E_2)\rangle$, with $E = E_1 + E_2$). With the electron-electron interaction turned on ($U=4$), this degeneracy is broken down and the stationary states can no more be written as a direct product. As we can see in Fig. 6(b), the electrons become correlated, with both of them showing approximately the same participation number, except the most localized ones that cannot be efficiently mixed by the electron-electron coupling. In Fig. 7, we plot the most delocalized and most localized participation number within the energy range $|E| < 0.5$ as a function of the chain size. One can clearly see that while the most delocalized state is indeed an extended state in the thermodynamic limit ($P_{\max} \propto N$), the most localized state occupies just a vanishing fraction of the chain ($P_{\min}/N \rightarrow 0$).

Motivated by the coexistence of localized and delocalized states within the same energy range for the two-electron sys-

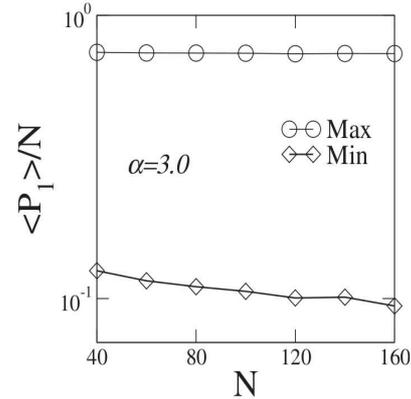


FIG. 7. The maximum and minimum participation numbers associated with a single electron versus N in the energy range around the band center ($-0.5 < E < 0.5$). Data were obtained using $N=40$ up to 160 sites, $\alpha=3$, $U=4$, and averaged over 500 distinct samples. The maximum participation number corresponds to an extended state ($P_{\max} \propto N$) while the minimal one is localized occupying a vanishing fraction of the chain in the thermodynamic limit ($P_{\min}/N \rightarrow 0$).

tem, we analyzed the level spacing statistics near the band center. This may display new features as compared with single electron systems for which extended and localized states usually do not coexist in the same energy range. In one-electron systems, localized states are uncorrelated in energy and distributed following a Poisson law $P(s) = e^{-s}$, where s is the level spacing measured in units of the mean spacing. In contrast, delocalized eigenfunctions repel each other and their level spacing distribution assumes the Wigner form $P(s) \propto s e^{-Cs^2}$.^{41,42} At the Anderson transition a new universal critical statistics intermediate between Wigner and Poisson has been suggested as a consequence of the multifractality of critical wave functions.⁴³ To obtain the level spacing distribution, we used an energy window near the band center ($-0.5, 0.5$). A spectral unfolding procedure was employed to keep the average level spacing equal to unity in each segment of the energy window.⁴³ In Fig. 8, we plot the level spacing distributions computed using $N=120$ sites, $\alpha=3$, $U=0$, $U=2$, and $U=4$. In the absence of electron-electron interaction, the level spacing distribution display a pronounced deltalike singularity at $s=0$. This is associated with the degeneracy of the total energy $E = E_1 + E_2$ with E_1 varying within the single electron energy band. From the total number N_0 of states enclosed in the energy interval considered, the number of degenerated states will be given by the total number of pairs $N_0^2/2$. The remaining states shall follow the usual Poisson distribution. Therefore we expect the level spacing to assume the combined form $P(s) = (1/2)\delta(s) + (1/4)e^{-s/2}$, where s is measured in units of the average level spacing, including the degenerated and nondegenerated ones. The presence of extended states does not affect the distribution because nondegenerated states that are nearest neighbors in energy are seldom a couple of extended states due to their intrinsic level repulsion. The straight line fitting the data for $U=0$ in the inset of Fig. 8 corresponds to the exponential term of the proposed distri-

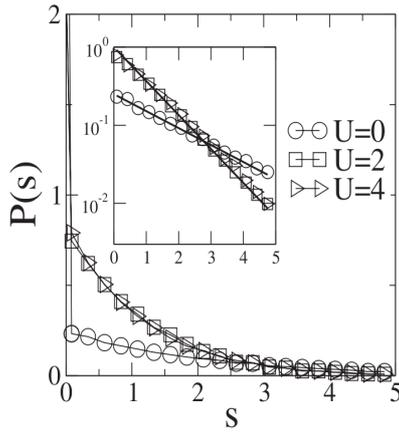


FIG. 8. Level spacing distributions computed using $N=120$ sites, $\alpha=3$, for distinct Hubbard couplings $U=0$, $U=2$, and $U=4$. Even at this strong correlated regime for which delocalized states are present near the band center, the level spacing distributions display a Poisson-type form $P(s) \propto \exp(-As)$. $P(s)$ has a deltalike singularity at $s=0$ for $U=0$, signaling the degeneracy in the energy spectrum. The electron-electron interaction removes the degeneracy and $P(s)$ reassumes the usual Poisson form irrespective to the strength of the Hubbard coupling.

bution. For interacting electrons, the degeneracy is broken and the delta singularity is removed. The distribution recovers its usual Poisson form $P(s)=\exp(-s)$, as shown by the line fitting the data for finite U in the inset of Fig. 8. The small deviation at small s is a finite-size effect. It is important to notice the universality of the level spacing distribution with regard to the interaction strength U .

III. SUMMARY AND CONCLUSIONS

In this work, we studied the problem of two interacting electrons on a 1D lattice with on-site long-range correlated disorder. Long-range correlations were introduced by using a discrete Fourier method which generates an appropriate disorder distribution with spectral density $S(k) \propto 1/k^\alpha$. In the regime of strong correlations ($\alpha > 2$) this model presents a finite-energy range around the band center with extended eigenstates. In this regime, the introduction of an electron-electron coupling leads to the trapping of a finite fraction of the wave packet around its initial position, thus resulting in a

finite return probability and a correlated electronic distribution.

With the electric field F turned on, the motion of the wave packet depicts incoherent oscillations in the weak correlation limit $\alpha < 2$, due to the localized nature of all electronic eigenstates. However, in the strongly correlated regime ($\alpha > 2$) and in the absence of an electron-electron interaction, the wave-packet centroid develops coherent Bloch oscillations whose characteristic frequency is given by $\omega = eFa/\hbar$ according to a semiclassical approach,¹⁶ where e is the electron charge and a is the lattice spacing. For interacting electrons, the wave-packet centroid shows complex Bloch oscillations revealing a multifrequency spectrum. The power spectrum of the centroid velocity trace develops a splitting of the usual peak at $\omega = eFa/\hbar$ and the emergence of a frequency doubled component. Such frequency doubling phenomenon is similar to the one previously reported in Ref. 36 for two electrons moving in a 1D pure chain. It is associated with the emergence of two-electron bounded states. For these components of the wave packet, the coupled electrons effectively behave as a single particle with charge $2e$, thus leading to the frequency doubling of the Bloch oscillations.

Finally, we computed the participation number of the two-electron eigenstates and the level spacing distribution around the center of the energy band in the regime of strong correlations. For noninteracting electrons, the states near the band center are highly degenerated, with localized and extended two-electron states coexisting. This feature contrasts with the usual behavior of single electron systems for which localized and extended states might be separated by mobility edges. Although the degeneracy impacts the level spacing statistics, the presence of extended states is irrelevant, with the distribution function being well described by the superposition of a deltalike peak and a Poissonian decay. The electron-electron interaction correlates the two-electron wave function which reduces the energy levels degeneracy. In this case, the level spacing distribution reassumes its usual pure Poissonian form which has a universal character irrespective to the electron-electron coupling.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES, FINEP, Rede Nanobioestruturas, as well as by the Alagoas State research agency FAPEAL.

¹B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993); E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979); for a review see, e.g., I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul, and L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).

²B. Huckestein and L. Schweitzer, Phys. Rev. Lett. **72**, 713 (1994).

³R. Ketzmerick, K. Kruse, S. Kraut, and T. Geisel, Phys. Rev.

Lett. **79**, 1959 (1997).

⁴J. C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 8471 (1989).

⁵D. H. Dunlap, H.-L. Wu, and P. W. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990); H.-L. Wu and P. W. Phillips, *ibid.* **66**, 1366 (1991); P. W. Phillips and H.-L. Wu, Science **252**, 1805 (1991).

⁶A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, J. Phys. A **27**, 3725 (1994); A. Sánchez, E. Maciá, and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **49**, 147 (1994).

⁷F. A. B. F. de Moura, M. N. B. Santos, U. L. Fulco, M. L. Lyra,

- E. Lazo, and M. E. Onell, *Eur. Phys. J. B* **36**, 81 (2003); S. S. Albuquerque, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, and E. Lazo, *Phys. Lett. A* **355**, 468 (2006).
- ⁸F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998); *Physica A* **266**, 465 (1999).
- ⁹F. M. Izrailev and A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999); F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 041102(R) (2001).
- ¹⁰G. P. Zhang and S.-J. Xiong, *Eur. Phys. J. B* **29**, 491 (2002).
- ¹¹H. Shima, T. Nomura, and T. Nakayama, *Phys. Rev. B* **70**, 075116 (2004).
- ¹²G. Schubert, A. Weiße, and H. Fehske, *Physica B* **359-361**, 801 (2005).
- ¹³F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, and M. L. Lyra, *Europhys. Lett.* **66**, 585 (2004).
- ¹⁴V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gomez-Alcala, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999); V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G. B. Parravicini, and F. Domínguez-Adame, *Physica E (Amsterdam)* **7**, 823 (2000).
- ¹⁵U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. Krokhin, and H. J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 633 (2000).
- ¹⁶F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 197402 (2003).
- ¹⁷F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, F. Domínguez-Adame, and V. A. Malyshev, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 056204 (2007).
- ¹⁸D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2607 (1994).
- ¹⁹Y. Imry, *Europhys. Lett.* **30**, 405 (1995).
- ²⁰K. Frahm, A. Muller-Goeling, J.-L. Pichard, and D. Weinmann, *Europhys. Lett.* **31**, 169 (1995).
- ²¹P. Jacquod and D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3501 (1995).
- ²²Y. V. Fyodorov and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **52**, R11580 (1995).
- ²³K. Frahm, A. Muller-Groeling, and J.-L. Pichard, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1509 (1996).
- ²⁴M. Leadbeater, R. A. Romer, and M. Schreiber, *Eur. Phys. J. B* **8**, 643 (1999).
- ²⁵K. Frahm, *Eur. Phys. J. B* **10**, 371 (1999).
- ²⁶O. Halfpap, *Ann. Phys.* **10**, 623 (2001).
- ²⁷A. Eilmès, R. A. Romer, and M. Schreiber, *Eur. Phys. J. B* **23**, 229 (2001).
- ²⁸A. Eilmès, U. Grimm, R. A. Romer, and M. Schreiber, *Eur. Phys. J. B* **8**, 547 (1999).
- ²⁹R. A. Römer and M. Schreiber, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 515 (1997).
- ³⁰S. N. Evangelou, S.-J. Xiong, and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **54**, 8469 (1996).
- ³¹S. N. Evangelou and D. E. Katsanos, *Phys. Rev. B* **56**, 12797 (1997).
- ³²F. Claro, J. F. Weisz, and S. Curilef, *Phys. Rev. B* **67**, 193101 (2003).
- ³³A. Buchleitner and A. R. Kolovsky, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 253002 (2003).
- ³⁴J. K. Freericks, V. M. Turkowski, and V. Zlatić, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266408 (2006).
- ³⁵G. Xianlong, M. Polini, M. P. Tosi, V. L. Campo, K. Capelle, and M. Rigol, *Phys. Rev. B* **73**, 165120 (2006).
- ³⁶W. S. Dias, E. M. Nascimento, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, *Phys. Rev. B* **76**, 155124 (2007).
- ³⁷W. S. Dias, E. M. Nascimento, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2304 (2009).
- ³⁸H. N. Nazareno and P. E. de Brito, *Phys. Rev. B* **60**, 4629 (1999).
- ³⁹F. A. B. F. de Moura, L. P. Viana, M. L. Lyra, V. A. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, *Phys. Lett. A* **372**, 6694 (2008).
- ⁴⁰I. F. dos Santos, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, and M. D. Coutinho-Filho, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 476213 (2007).
- ⁴¹M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic, Boston, 1991).
- ⁴²R. P. A. Lima, H. R. da Cruz, J. C. Cressoni, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **69**, 165117 (2004).
- ⁴³S. N. Evangelou and D. E. Katsanos, *J. Stat. Phys.* **85**, 525 (1996).

Anexo **E**

Artigo: Interação elétron-fônon em redes quadradas e hexagonais

Effects of nonlinearity on wave-packet dynamics in square and honeycomb lattices

W. S. Dias, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió 57072-970, AL, Brazil

(Received 18 June 2010; revised manuscript received 10 September 2010; published 9 December 2010)

We offer a comparative study of the self-trapping phenomenon in square and honeycomb lattices, showing its dependence on the initial condition and lattice topology. In order to describe the dynamical behavior of one-electron wave packets, we use a discrete nonlinear Schrödinger equation which effectively takes into account the electron-phonon interaction in the limit of an adiabatic coupling. For narrow wave packets and strong nonlinearities, the electron distribution becomes trapped irrespective to the lattice geometry. In the opposite regime of wide wave packets and small nonlinearities, a delocalized regime takes place. There is an intermediate regime for which self-trapping is attained in the honeycomb lattice while the wave packet remains delocalized in square lattices. Further, we show that the critical nonlinear strength χ_c scales linearly with the initial wave-packet participation function $P(0)$ with the ratio $\chi_c/P(0)$ being on the order of the energy bandwidth.

DOI: [10.1103/PhysRevB.82.233102](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.233102)

PACS number(s): 72.10.Di, 68.65.Pq, 72.80.Vp

I. INTRODUCTION

Within the context of fermions or bosons dynamics subjected to interaction with lattice vibrations, the effective description based on a discrete nonlinear Schrödinger equation (DNLSE) (Refs. 1–18) has attracted a wide interest. An effective cubic term in the time-dependent Schrödinger equation for the electron wave-packet dynamics arises after treating the phonon degrees of freedom within an adiabatic approximation which assumes that the local site polarization is much faster than the electron transfer between sites. The nonlinearity present in the DNLSE captures some essential features related to the electron-phonon dynamics,^{1–10} Bose-Einstein condensates (BECs),^{11,12} optical lattices,^{13,14} rogue waves,¹⁵ and coupled optical waveguides.^{16,17}

Within the electron-phonon dynamics context, the most important property associated with the DNLSE is the emergence of the so-called self-trapping phenomenon. In this case, an initially localized electronic wave packet remains localized in a finite region and there is a significant time-averaged probability to find the particle at the initial site. In Refs. 4 and 5, a very instructive amount of results about nonlinearity and electronic dynamics was reported. In particular, it was shown that either linear hosts with the presence of a nonlinear impurity or fully nonlinear lattices exhibit a self-trapping transition with universal features which are not affected by the lattice topology.⁵ Moreover, it was demonstrated that the DNLSE can display a wide class of topologically stable solutions such as solitons, vortex rings, and breathers (oscillatory solitonlike solutions).^{6–8} The standing or traveling nature of these solutions is associated to many properties of nonlinear discrete systems as, for example, energy transfer in biological chains.^{7,8} In fact, the presence of discrete solitons and breathers induced by nonlinearity has been intensive studied within the context of (BEC) (Ref. 9) waveguide arrays^{10,12} and general nonlinear systems.¹⁸

Recent experimental investigations using photoemission spectra have been widely used to investigate effects of electron-phonon interaction in pentacene films¹⁹ and graphene structures.²⁰ Graphene is a monolayer of carbon

atoms packed into a dense honeycomb crystal structure that can be viewed as an individual atomic plane extracted from graphite. Experimental developments have directed us closer to graphene-based nanoelectronics with components or even entire circuits formed from a graphene sheet. The graphene could allow electronic devices since it can be the best possible metal for metallic transistor applications.²¹ Following a description based on Dirac equations to graphene structures, the effects of electron-phonon interaction was studied.²² Within the cubic nonlinear Schrödinger equation context, the influence of the effective cubic nonlinearity arising from the adiabatic electron-phonon coupling in the electron dynamics was considered in two-dimensional lattices similar to graphene structures.^{23,24} In Ref. 23 the existence and stability of localized states in the discrete cubic nonlinear Schrödinger equation on two-dimensional nonsquare lattices was studied. The role played by nearest-neighbor as well as long-range interactions was pointed out in detail.²³ Furthermore, it was provided a systematic classification of the solutions that arise in hexagonal and honeycomb lattices with cubic nonlinearity.²⁴ The dynamics reveals the emergence of single-site solitary wave forms with a multisite breathing structure.²⁴

Motivated by the particular features of graphene,²² particularly its hexagonal geometry,²³ we offer a comparative study of the self-trapping phenomenon in square and honeycomb lattices, showing its dependence on the initial condition (initial width of wave packets). The self-trapping phenomenon is associated with the underlying interaction between electrons and lattice vibrations, responsible for a nonlinear contribution to the electronic Schrödinger equation. We will show that it takes stronger nonlinearities to promote self-trapping in square lattices than in honeycomb lattices and that the critical nonlinear strength scales linearly with the initial wave-packet distribution.

II. MODEL AND FORMALISM

In order to describe the dynamical behavior of an electron wave packet within a tight-binding approach, we used a dis-

crete nonlinear Schrödinger equation given by

$$i\hbar\dot{c}_{n,m}(t) = V \sum_{\langle n',m' \rangle} c_{n',m'}(t) - \chi |c_{n,m}(t)|^2 c_{n,m}(t), \quad (1)$$

where $c_{n,m}$ is the wave-packet amplitude at site (n,m) , V is the hopping amplitude between the nearest-neighbors sites $\langle n',m' \rangle$, and χ is a nonlinear parameter which is proportional to the local electron-phonon coupling.⁴ In what follows we will consider the particular cases of square and honeycomb geometries. Without any loss of generality, we are considering the on-site energies $\epsilon_{n,m}=0$ and will use units of $\hbar=V=1$.

To analyze the wave-packet propagation, we follow the time evolution of an initially Gaussian wave packet of width σ ,

$$c_{n,m}(0) = \frac{1}{A(\sigma)} \exp[-(n-n_0)^2/(4\sigma^2)] \times \exp[-(m-m_0)^2/(4\sigma^2)], \quad (2)$$

localized at site (n_0, m_0) . We employ the fourth-order Runge-Kutta method to numerically integrate Eq. (1). The electron will be considered to be initially located at the lattice center.

Aiming to characterize the dynamic behavior of the wave packet, we computed two typical quantities that can bring information about the possible self-trapping of the wave packet and its spacial extension, namely, the return probability and the participation function which are defined as

$$R(t) = |c_{n_0, m_0}(t)|^2 \quad (3)$$

and

$$P(t) = 1/\sum_{n,m} |c_{n,m}(t)|^4. \quad (4)$$

$R(t)$ gives the probability of finding the electron in the position corresponding to the center of the initial wave packet. Thus, $R(t \approx 10^6) \rightarrow 0$ means that the electronic wave function escapes from its initial location. Conversely, the return probability saturates at a finite value for a localized or a self-trapped wave packet. The participation function gives an estimate of the number of sites over which the wave packet is spread at time t . In the long-time regime, $P(t) \propto N^0$ indicates that the wave packet remains localized. On the other hand, $P(t) \propto N^2$ corresponds to the regime where the wave packet is distributed over the lattice.

III. SELF-TRAPPING IN HONEYCOMB AND SQUARE LATTICES

In Figs. 1(a) and 1(b), we show the time evolution of the participation function $P(t)$ computed for a wave packet with an initial Gaussian profile with participation function $P(t=0)=4$ spreading on (a) honeycomb and (b) square lattices with $N \times N = 1500 \times 1500$ sites and distinct strengths of the nonlinear parameter $\chi=25, 35$, and 50 . The wave-packet dynamics displays the same typical behavior for both lattices. For small values of χ , which represents a weak electron-phonon coupling, the wave packet extends continuously over

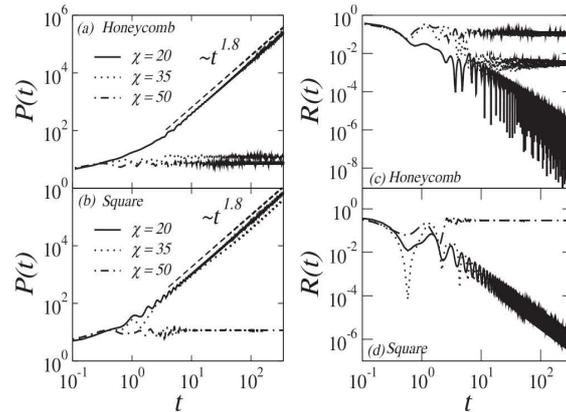


FIG. 1. Left panel: participation function $P(t)$ computed for lattices with $N \times N = 1500 \times 1500$ sites and different values of the nonlinear coupling $\chi=20, 35$, and 50 in (a) honeycomb and (b) square lattices. In all cases, the initial wave packet has a participation function $P(t=0)=4$. The reported data show the self-trapping of the wave packet as the strength of the electron-phonon coupling is increased. This feature is less pronounced in the square than in the honeycomb lattice. Right Panel: return probability $R(t)$ for the same values of lattice size, nonlinear couplings, and initial wave-packet extension in (c) honeycomb and (d) square lattices. The probability of return shows that, as we increase the nonlinear coupling, self-trapping occurs in the honeycomb lattice at smaller values of the nonlinearity than in the square lattice.

the entire lattice. For strong nonlinearities, the electron remains localized around its initial position. However, when comparing Figs. 1(a) and 1(b), we see that the electron is more susceptible to the electron-phonon coupling in the honeycomb than in the square lattice. Notice that the wave packet is extended in the square lattice and localized in the honeycomb lattice for the intermediate nonlinearity $\chi=35$. Such localization of the wave packet is the so-called self-trapping, on which the electron remains around its initial position due to its coupling with the lattice vibrations. In the delocalized regime, the growth of the participation function ultimately saturates for long runs as the wave packet reaches the lattice boundaries. This saturation is not reported in Fig. 1. In this case, the saturation value scales with the total number of lattice sites, in contrast with the size-independent value of the asymptotic participation function observed for self-trapped wave packets.

In order to better characterize the self-trapping phenomenon, we also report the time evolution of the return probability $R(t)$ for a wave packet with initial participation function $P(t=0)=4$ on the honeycomb lattice [Fig. 1(c)] and on the square lattice [Fig. 1(d)]. When the electron-phonon interaction is small, the electron becomes delocalized and the probability of finding it in the initial wave-packet position vanishes as t evolves. Conversely, the amplitude remains finite for a self-trapped wave packet, a phenomenon that takes place in the strong-coupling regime.

Data for the normalized participation function in the asymptotic regime $P(t \approx 10^6)/N^2$ versus the nonlinear parameter χ are shown in Fig. 2(a) for wave packets with an initial participation function of $P(t=0)=4$. In this case, the

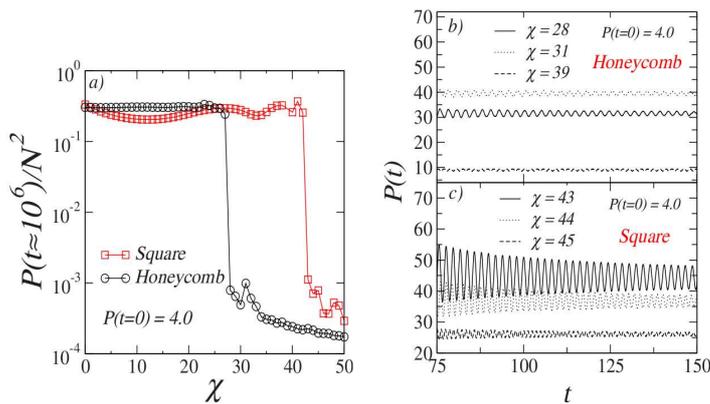


FIG. 2. (Color online) (a) Normalized asymptotic participation function $P(t \approx 10^6)/N^2$ versus the nonlinear coupling χ . An initial wave packet with $P(t=0)=4$ is considered. Notice a regime of intermediate nonlinearities for which self-trapping takes place in the honeycomb lattice while the wave packet remains delocalized in the square lattice. [(b) and (c)] The time evolution of the participation function in the vicinity of the self-trapping transition in (b) honeycomb and (c) square lattices. The oscillatory behavior is related to the breathing character of the self-trapped wave packets.

wave packet was allowed to spread until reaching a stationary state due to either reflections at the lattice boundaries or to self-trapping. A well defined self-trapping transition can be observed in both honeycomb and square lattices. In the delocalized phase, the participation function is on the order of the number of lattice sites. It exhibits a pronounced decrease at the critical nonlinearity strength above which the wave packet becomes trapped. These data show clearly that there is a range of nonlinear strengths for which self-trapping only takes place in the less connected honeycomb lattice. In addition, we show the time-dependent participation number versus time for wave packets with an initial participation function of $P(t=0)=4$ in both honeycomb and square lattices. Calculations were done considering nonlinearity degrees above the critical point. In Figs. 2(b) and 2(c), we show the time evolution of the participation function in the vicinity of the self-trapping transition. The oscillatory behavior reflects the breathinglike character of the self-trapped state.^{10,12,18,23} The oscillation amplitude decreases as one goes deeper into the self-trapped phase.

In order to quantify this comparative study of the self-trapping phenomenon in square and honeycomb lattices, we plot the phase diagram in the $P(t=0) \times \chi$ plane in Fig. 3. The extended states were characterized using the criterion $R(t \approx 10^6) \propto 1/N^2$ and $P(t \approx 10^6) \propto N^2$. The phase diagram depicts three main regions. The wave packet becomes delocalized in both square and honeycomb lattices for wide initial wave packets and small nonlinear strengths. In the opposite region of narrow initial wave packets and large nonlinear strengths, the wave-packet self-trapping predominates on both lattices. There is an intermediate stripe of the phase diagram in which self-trapping occurs in the less connected honeycomb lattice but not in the more connected square lattice. It is interesting to notice that the critical nonlinear strength on both lattices is proportional to the initial participation number and that the ratio $\chi_c/P(0)$ is on the order of the energy bandwidth. These results explicitly show the dependency of the self-trapping phenomenon on the initial condition (width of the wave packet) and that the local topology of the lattice is a relevant ingredient. In the inset of Fig. 3, we plot the critical nonlinear strength normalized by the lattice coordination number. The curves from square and honeycomb lattices collapse showing that the lattice coordination is actually the relevant topological parameter influencing the self-trapping transition.

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

In this work, we provided a detailed study of the one-electron wave-packet self-trapping transition in square and honeycomb lattices. Self-trapping results from a nonlinear contribution to the Schrödinger time-dependent equation for the wave-packet dynamics that arises from the adiabatic coupling of the moving electron with the underlying lattice vibrations. For strong nonlinear couplings, the effective on-site potential around which the electron is initially placed becomes well above the energy band. This leads to a decoupling of this energy level and, consequently, to the wave-packet trapping. We provided a comparative study of the self-trapping transition in typical two-dimensional lattices in order to characterize the influence of the lattice topology, as well as the influence of the initial wave-packet profile. We showed that in the less connected honeycomb lattice, a smaller nonlinear strength is required to promote self-

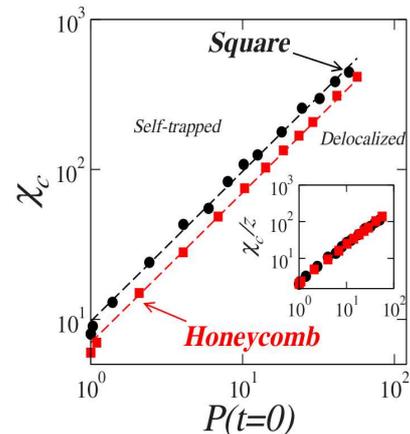


FIG. 3. (Color online) Phase diagram in the $P(t=0) \times \chi$ parameter space showing the transition from the delocalized to the self-trapped phase. The regime of delocalized wave packets was characterized using the criterion $R(t \approx 10^6) \propto 1/N^2$ and $P(t \approx 10^6) \propto N^2$. It takes stronger nonlinearities to promote self-trapping in square lattices than in honeycomb lattices. In both cases, the critical nonlinearity scales linearly with the initial participation function. In the inset, we report the critical nonlinearity normalized by the lattice coordination number. The collapse of the curves indicates that the lattice coordination is the relevant topological parameter for the self-trapping transition.

trapping. This feature is directly related to the fact that the honeycomb lattice depicts a narrower energy band when compared to the more connected square lattice. Therefore, the lattice coordination is the relevant topological parameter controlling the self-trapping transition. Further, we showed that the critical nonlinear strength scales linearly with the participation function of the initial wave packet. For both lattices, the ratio between the critical nonlinear strength and the initial participation function is on the order of the energy bandwidth. Therefore, the self-trapping localization transition is strongly influenced by both lattice topology and wave-

packet initial distribution. It would be interesting to extend the present scenario to more general models incorporating electron-electron interactions, disorder, and nonlinearity, in order to settle the relative role played by Mott, Anderson and self-trapping localization in distinct lattice topologies.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), CNPq-Rede Nanoestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas State Agencies).

-
- ¹G. Kopidakis, S. Komineas, S. Flach, and S. Aubry, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 084103 (2008); A. S. Pikovsky and D. L. Shepelyansky, *ibid.* **100**, 094101 (2008); D. Hajnal and R. Schilling, *ibid.* **101**, 124101 (2008); S. Flach, D. O. Krimer, and Ch. Skokos, *ibid.* **102**, 024101 (2009); Ch. Skokos, D. O. Krimer, S. Komineas, and S. Flach, *Phys. Rev. E* **79**, 056211 (2009).
- ²F. A. B. F. de Moura, I. Gléria, I. F. dos Santos, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 096401 (2009); F. A. B. F. de Moura, E. J. G. G. Vidal, I. Gléria, and M. L. Lyra, *Phys. Lett. A* **374**, 4152 (2010).
- ³V. M. Kenkre and D. K. Campbell, *Phys. Rev. B* **34**, 4959 (1986); V. M. Kenkre and H.-L. Wu, *ibid.* **39**, 6907 (1989); P. Grigolini, H.-L. Wu, and V. M. Kenkre, *ibid.* **40**, 7045 (1989).
- ⁴D. Chen, M. I. Molina, and G. P. Tsironis, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 8689 (1993); **8**, 6917 (1996); C. A. Bustamante and M. I. Molina, *Phys. Rev. B* **62**, 15287 (2000); M. I. Molina, *ibid.* **58**, 12547 (1998).
- ⁵M. I. Molina, *Phys. Rev. B* **60**, 2276 (1999); G. P. Tsironis, M. I. Molina, and D. Hennig, *Phys. Rev. E* **50**, 2365 (1994); M. I. Molina, *Mod. Phys. Lett. B* **13**, 837 (1999).
- ⁶E. Arévalo, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 224102 (2009); M. Öster and M. Johansson, *Phys. Rev. E* **73**, 066608 (2006).
- ⁷O. Braun and Yu. S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, 1 (1998).
- ⁸D. Hennig and G. P. Tsironis, *Phys. Rep.* **307**, 333 (1999).
- ⁹A. Trombettoni and A. Smerzi, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2353 (2001).
- ¹⁰J. W. Fleischer, T. Carmon, M. Segev, N. K. Efremidis, and D. N. Christodoulides, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 023902 (2003).
- ¹¹B. B. Wang, P. M. Fu, J. Liu, and B. Wu, *Phys. Rev. A* **74**, 063610 (2006).
- ¹²J.-K. Xue and A.-X. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 180401 (2008).
- ¹³N. Akhmediev, A. Ankiewicz, and J. M. Soto-Crespo, *Phys. Rev. E* **80**, 026601 (2009).
- ¹⁴S. A. Ponomarenko and G. P. Agrawal, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 013901 (2006).
- ¹⁵A. Maluckov, Lj. Hadzievski, N. Lazarides, and G. P. Tsironis, *Phys. Rev. E* **79**, 025601(R) (2009).
- ¹⁶Y. Lahini, A. Avidan, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D. N. Christodoulides, and Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 013906 (2008).
- ¹⁷Th. Anker, M. Albiez, R. Gati, S. Hunsmann, B. Eiermann, A. Trombettoni, and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 020403 (2005).
- ¹⁸N. K. Efremidis and K. Hizanidis, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 143903 (2008); J. Cuevas, L. Q. English, P. G. Kevrekidis, and M. Anderson, *ibid.* **102**, 224101 (2009); G. Assanto, L. A. Cisneros, A. A. Minzoni, B. D. Skuse, N. F. Smyth, and A. L. Worthy, *ibid.* **104**, 053903 (2010); R. A. Vicencio and S. Flach, *Phys. Rev. E* **79**, 016217 (2009).
- ¹⁹R. C. Hatch, D. L. Huber, and H. Höchst, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 047601 (2010).
- ²⁰M. Bianchi, E. D. L. Rienks, S. Lizzit, A. Baraldi, R. Balog, L. Hornekaer, and Ph. Hofmann, *Phys. Rev. B* **81**, 041403 (2010); A. Grüneis, C. Attaccalite, A. Rubio, D. V. Vyalikh, S. L. Molodtsov, J. Fink, R. Follath, W. Eberhardt, B. Büchner, and T. Pichler, *ibid.* **79**, 205106 (2009).
- ²¹K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- ²²A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. Pere, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- ²³P. G. Kevrekidis, B. A. Malomed, and Yu. B. Gaididei, *Phys. Rev. E* **66**, 016609 (2002).
- ²⁴K. J. H. Law, P. G. Kevrekidis, V. Koukouloyannis, I. Kourakis, D. J. Frantzeskakis, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. E* **78**, 066610 (2008).