



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

MICHELE BERTOLDO COELHO

A INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO
ELÉTRON-ELÉTRON NA
LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON E NA
LOCALIZAÇÃO DINÂMICA EM
SISTEMAS DE BAIXA DENSIDADE
ELETRÔNICA

MACEIÓ

2020

MICHELE BERTOLDO COELHO

A INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO
ELÉTRON-ELÉTRON NA LOCALIZAÇÃO DE
ANDERSON E NA LOCALIZAÇÃO DINÂMICA
EM SISTEMAS DE BAIXA DENSIDADE
ELETRÔNICA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas
como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Wandearley da Silva Dias

MACEIÓ

2020

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

C672i Coêlho, Michele Bertoldo.

A influência da interação elétron-elétron na localização de Anderson e na localização dinâmica em sistemas de baixa densidade eletrônica / Michele Bertoldo Coêlho. – 2019.

120 f. : il., figs. e tabs. color.

Orientador: Wandearley da Silva Dias.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. Maceió, 2020.

Bibliografia: f. 85-93.

Apêndices: f. 94-120.

1. Transporte eletrônico. 2. Interação elétron-elétron. 3. Modelo de Anderson. 4. Oscilações de Bloch. I. Título.

CDU: 538.935

Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física
Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões

Cidade Universitária

Tabuleiro dos Martins

57072-970 Maceió - AL. Brasil

FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE

dissertação DE mestrado

“A influência da interação elétron-elétron na localização de Anderson e na localização dinâmica em sistemas de baixa densidade eletrônica”

por

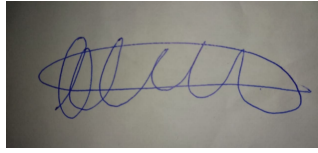
Michele Bertoldo Coêlho

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; e Jonas Romero Fonseca de Lima, da Universidade Federal Rural de Pernambuco consideram a candidata aprovada com grau “A”.

Maceió, 31 de julho de 2020.



Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra



Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura



Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima

AGRADECIMENTOS

Agradeço à todos que me foram voz humana em meio a semideuses

Que me confessaram não um pecado, mas uma infâmia;

Que me contaram, não uma violência, mas uma cobardia!

(Inspirado no poema em linha reta de Fernando Pessoa)

*”E não há no reino mineral
Nenhum poder de pedra que estanque
O jorro das gotinhas”
(Olho D’Água - Maria Bethânia)*

RESUMO

Propriedades de transporte eletrônico em sistemas de elétrons interagentes é um tema central dentro da física de estado sólido. Entretanto, além do elevado custo computacional, tais sistemas podem apresentar restrições ao considerar métodos perturbativos. Neste cenário, modelos de baixa densidade eletrônica têm se mostrado uma boa alternativa para o estudo mostrando-se capaz de resgatar aspectos importantes presentes em sistemas de muitas partículas interagentes. Um desses fenômenos é o enfraquecimento da localização de Anderson promovido pela interação elétron-elétron. Tal fenomenologia foi reportada inicialmente em estudos experimentais de correntes persistentes em anéis mesoscópicos. Entretanto, comportamentos semelhantes estão presentes em férmions em redes óticas, condensados ultra frios, modelos de Anderson-Hubbard em 1D, 2D e 3D, e vidros de Coulomb 2D, sugerindo algum grau de competição entre desordem e interação. Entre os trabalhos sobre esta temática, destacamos o trabalho de Dias e Lyra[*Physica A* 411 (2014) 35–41], que estudaram dois elétrons se movendo em um potencial desordenado unidimensional e mostraram uma influência não monotônica da interação elétron-elétron na localização de Anderson. Outro fenômeno interessante que surge da proposta de baixa densidade eletrônica é o dobramento da frequência de Bloch causado pela interação entre elétrons em sistemas 1D, indo de encontro com resultados de muitos corpos que mostravam que a interação atua destrutivamente nas oscilações de Bloch. O resultado do dobramento foi previsto teoricamente pelo trabalho de Dias e colaboradores[*Phys. Rev. B* 76 (2007) 155124] e confirmado mais tarde experimentalmente[*Science* 347 (2015) 1229–1233]. No corpo desta dissertação apresentamos estudos envolvendo os dois cenários. Em um primeiro momento, nós investigamos a existência do caráter não monotônico da localização de Anderson em redes unidimensionais com desordem estrutural[*Physica E* 124 (2020) 114371]. Posteriormente, apresentamos nossos estudos considerando as oscilações de Bloch para sistemas de elétrons interagentes, considerando agora a inclusão de um termo de interação entre as partículas não-local. Os dois sistemas estudados mostram o papel relevante que a interação pode desempenhar sobre a dinâmica dos elétrons. Os resultados revelam aspectos competitivos entre diferentes estados eletrônicos presentes no sistema.

Palavras-chave: propriedades de transporte, interação elétron-elétron, desordem, oscilações de Bloch.

ABSTRACT

Electronic transport properties in systems of interacting electrons are a central topic within solid state physics. However, besides the high computational cost, these systems can feature restrictions to consider perturbative methods. In this scenario, low electronic density models have been proven as a good alternative to the study, being able to rescue important aspects which are present in many interacting particle systems. One of this phenomenon is the weakening of Anderson localization promoted by electron-electron interaction. Such phenomenology was reported initially in experimental studies of persistent currents in mesoscopic rings. However, similar behavior is present in fermions in optical grids, ultracold condensates, Anderson-Hubbard in 1D, 2D and 3D and 2D Coulomb glasses, suggesting some degree of competition between disorder and interaction. Among these works on this topic, we highlight the paper of Dias and Lyra[Physica A 411 (2014) 35–41], who studied two electrons moving in a random one-dimensional potential landscape, where has been demonstrated a nonmonotonic influence of the electron-electron interaction on the Anderson localization. Another interesting phenomenon arises from the low-density proposal is the Bloch frequency doubling caused by the interaction between electrons in 1D systems, going against results of many-body which showed that the interaction acts destructively on the Bloch oscillations. The result of the Bloch frequency doubling was theoretically foreseen by Dias and coauthors[Phys. Rev. B 76 (2007) 155124] and experimentally proven later[Science 347 (2015) 1229–1233]. In the present thesis we present studies involving both scenarios. At a first moment we investigated the existence of non monotonic behavior of Anderson localization in one-dimensional chain with structural disorder[Physica E 124 (2020) 114371]. Later, we presented our studies considering the Bloch oscillations for a system of interacting electrons, assuming now the inclusion of a non-local interaction between particles term. Both systems studied reveal the relevant role which inclusion of interaction between particles term can effect on the electrons dynamics. The results reveal competitive aspects between different electronic states present in the system.

Key-words: transport properties, electron-electron interaction, disorder, Bloch oscillations.

LISTA DE FIGURAS

1	Redes de Bravais (a) bidimensional e (b) tridimensional.	20
2	Possíveis opções de vetores primitivos de uma rede de Bravais bidimensional.	20
3	Construção da célula de Wigner-Seitz para uma de Bravais bidimensional.	21
4	Potencial periódico para um cristal unidimensional com vetor da rede de Bravais \vec{a}	22
5	Representação da estrutura de bandas para material condutor, semicondutor e isolante a partir do custo energético para os elétrons transitarem entre os níveis.	24
6	Energia para elétrons livres (curva verde) e elétrons de Bloch (curva laranja) em função do vetor de onda k	25
7	(a) Densidade de estados para rede cristalina de 1000 sítios; (b) participação e (c) participação dividida por N para diferentes tamanhos de cadeia.	27
8	Estruturas (a) cristalina perfeita e com desordens (b) composicional e (c) estrutural.	28
9	Típicas funções de ondas de estados (a) estendidos com livre caminho médio l e (b) localizados com comprimento de localização ξ	29
10	Construção de amostras (a) unidimensional, (b) bidimensional e (c) tridimensional a partir de blocos.	31
11	Função de escala $\beta(g)$ para diferentes dimensões.	32
12	(a) Densidade de estados, (b) participação de rede composicionalmente desordenada de 1000 sítios para diferentes larguras de desordem W e (c) participação escalada com N para $W = 3$	34
13	(a) Densidade de estados, (b) participação de rede estruturalmente desordenada de 2000 sítios para diferentes larguras de desordem W e (c) participação escalada com N para $W = 0.50$	35
14	Densidade de estados para (a) isolante; (b) condutor; (c) elétrons fracamente interagentes.	37
15	Densidade de estados para rede cristalina de 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U	43
16	Densidade de estados para rede cristalina de 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U	44
17	Amplitude de probabilidade de dois elétrons percorrendo cadeia de 500 sítios preparados inicialmente a diferentes distâncias do centro $d_0 = 0$ e 10 e seu gráfico de contorno para $U = 0, 2$ e 6, $t = 117, 2$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	46

18	Extensão espacial de cadeia cristalina de 1500 íons percorrida por dois elétrons com diferentes interações U , com $\Delta t = 2^{-2}$ e $l_0 = 18$	47
19	Densidade de estados para redes com 100 sítios desordenados composicionalmente percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U e duas larguras de desordem ($W = 1$ e $W = 4$) utilizando 10 amostras.	48
20	(a) Extensão espacial de 18 amostras de 500 íons com desordem composicional percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U , com $\Delta t = 0,01$ e $W = 1$; (b) Média da extensão para $t \rightarrow \infty$ em função da interação.	49
21	Densidade de estados para redes com 100 sítios com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U , larguras de desordem $W = 0.5$ e $W = 1.0$ e utilizando 10 amostras.	51
22	(a) Extensão espacial de 2500 íons com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U , $\Delta t = 0.06$ e $W = 0.5$; (b) Média da extensão para $t \rightarrow \infty$ em função da interação para diferentes larguras de desordem W	52
23	Média da extensão espacial em tempos longos para de 2500 íons com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U em função da largura de desordem	54
24	(a-c) Distância média para 40 configurações de desordem, (d-f) logaritmo da participação (pontos pretos) e da participação média (pontos amarelos) (g-i) participação média para uma cadeia de 100 íons com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U em função da energia.	55
25	(a) Média das distância média e (b) participação média para os valores de energia correspondentes às sub-bandas de estados ligados, não ligados e ao oposto dos ligados para uma cadeia de 100 íons com desordem composicional percorrida por dois elétrons com largura de desordem $W = 0.50$ em função da interação entre os elétrons U	56
26	(a) Energia e (b) velocidade para elétrons de Bloch em função do vetor de onda k	61
27	Centróide e sua transformada de Fourier de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 10$ e diferentes interações U e submetidos a campo elétrico constante $F = 0.5$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	65
28	Centróide e sua transformada de Fourier de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.5$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	66

29	Centróide e sua transformada de Fourier de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e submetidos a campo elétrico constante $F = 0.5$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	67
30	Densidade de estados para rede cristalina com 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U com e sem interação não-local V	70
31	Correlação para rede cristalina com 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U com e sem interação não-local V	71
32	Amplitude de probabilidade para $N = 500$ sítios em função das posições dos elétrons $n_{\uparrow} \times n_{\downarrow}$ para diferentes valores de interação U	72
33	Transformada de Fourier do centróide de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 10$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.50$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	74
34	Centróide de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.50$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	75
35	Transformada de Fourier do centróide de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.50$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	76
36	Média da probabilidade de dupla ocupação, ocupação de primeiros e segundos vizinhos para tempo longo de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons sem ($V = 0$) e com ($V = U/3$) interação não-local com distância inicial $d_0 = 0$ em função da interação U e a campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	77
37	Média da probabilidade de dupla ocupação, de ocupação de primeiros e segundos vizinhos para tempo longo de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons para diferentes larguras de pacotes iniciais σ com distância inicial $d_0 = 0$ em função da interação U e a campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	79
38	Média da probabilidade de dupla ocupação, de ocupação de primeiros e segundos vizinhos para tempo longo de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons para diferentes valores de interação não-local com distância inicial $d_0 = 0$ em função da interação U e a campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	81

LISTA DE TABELAS

- 1 Limites para as bandas de energia de estados não-ligados e ligados para o problema de dois elétrons interagentes. 104
- 2 Limites para as bandas de energia de estados não-ligados e ligados para o problema de dois elétrons interagentes na presença de interação não-local. . 113

CONTEÚDO

1	Introdução	14
2	Fundamentação Teórica	18
2.1	Modelo de Bloch	19
2.1.1	Rede Cristalina	19
2.1.2	Teorema de Bloch	21
2.1.3	Caso Unidimensional	24
2.2	Desordem e o Modelo de Anderson	28
2.2.1	Teoria de Escala da Localização	30
2.2.2	Caso Unidimensional	33
2.3	Modelo de Mott e Hubbard	36
2.4	Modelo de Baixa Densidade Eletrônica	38
3	Interação e Localização de Anderson	41
3.1	Interação Elétron-Elétron em Rede Cristalina	42
3.2	Interação Elétron-Elétron em Redes Desordenadas	48
3.2.1	Desordem Composicional	48
3.2.2	Desordem Estrutural	50
4	Interação e Oscilações de Bloch	58
4.1	Oscilações de Bloch	59
4.2	Interação Elétron-Elétron e Campo Elétrico	63
4.3	Interação Elétron-Elétron Não-Local e Campo Elétrico	68
4.3.1	Interação Elétron-Elétron Não-Local	68
4.3.2	Interação Não-Local e Campo Elétrico	72
5	Conclusão	83
	Referências	84
	Apêndice A – Prova do Teorema de Bloch	94
	Apêndice B – Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Bloch	96

Apêndice C – Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Anderson-Hubbard	98
Apêndice D – Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Hubbard	101
Apêndice E – Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Anderson-Hubbard Estendido	105
Apêndice F – Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Hubbard Estendido	108
Apêndice G – Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Anderson-Hubbard com Campo Elétrico	114
Apêndice H – Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Anderson-Hubbard Estendido com Campo Elétrico	117

1 INTRODUÇÃO

As propriedades de transporte em sólidos têm ocupado uma posição de destaque no estudo da física da matéria condensada desde o fim do século XIX¹. Abordagens da mecânica estatística e da mecânica quântica foram fundamentais para as investigações, levando ao aprimoramento dos modelos e entendimento de várias propriedades apresentadas em certos materiais. Entre os modelos mais conhecidos se encontra o modelo de Bloch[2].

Fundamentado na estrutura periódica e ordenada de cristais bem como na descrição quântica dos elétrons, este modelo é capaz de explicar as propriedades condutoras e isolantes de alguns materiais. Entretanto, alguns aspectos ausentes no modelo de Bloch, como a desordem e a interação entre as partículas, têm se mostrado relevantes na descrição das propriedades de transporte em determinadas classes de materiais. Ambas são responsáveis pelo caráter isolante em certos materiais, a que nos referimos isolantes de Anderson[3] e de Mott[4], respectivamente.

Sistemas que apresentam desordem são tratados a partir do modelo de Anderson[3]. Não devemos esquecer a teoria de escala da localização[5], que relaciona a transição metal-isolante descrita por Anderson com a dimensão do sistema. Apesar da proposta ser bastante aceita na comunidade científica, trabalhos recentes demonstram que alguns ingredientes fazem com que a previsão da teoria de escala seja violada[6]. Por outro lado, sistemas que apresentam interação entre as partículas são costumeiramente tratados a partir do modelo de Mott e do modelo de Hubbard[7, 8, 9, 10]. Neste caso, o comportamento isolante surge por causa do grande custo energético de ocupação dupla no sítio, inibindo assim o *hopping* eletrônico[4].

Modelos abordando ambos, desordem e interação elétron-elétron, têm despertado o interesse da comunidade científica pela possibilidade de comportamento metálico em sistema bidimensional desordenado com forte correlação entre os elétrons, contrastando com a previsão da teoria de escala. Entretanto, estudos numéricos de sistemas de muitos corpos interagentes apresentam como dificuldade o alto custo computacional devido ao fato do número de estados eletrônicos aumentarem exponencialmente com o tamanho do sistema. Outro fator também relevante é a natureza não perturbativa do problema, visto

¹Recomendo um artigo interessante sobre o surgimento e o crescimento da Física da Matéria Condensada[1].

que o termo de interação não é pequeno o suficiente para ser considerado como parâmetro em uma expansão perturbativa do problema.

A literatura apresenta solução exata para o caso cristalino com partículas interagentes apenas para sistemas unidimensionais[11, 12, 13]. A adição de desordem torna o sistema mais complexo, uma vez que seus estados não podem ser mais fatorados. Apesar das dificuldades, tal fenomenologia tem sido explorada em diferentes estudos, como por exemplo Henseler e Kroha que resolveram o sistema unidimensional com desordem composicional utilizando aproximações analíticas para o sistema de muitos corpos[14]; Gambetti-Césare *et al* que estudaram o sistema unidimensional de muitos corpos com desordem composicional[15]; e Habibi *et al* que resolveram o sistema de muitos corpos bidimensional de estrutura favo de mel[16].

Dentro deste contexto, surge uma proposta de estudar duas partículas interagentes sob presença de desordem[17]. Tal abordagem tem se mostrado capaz de resgatar aspectos relevantes presentes na análise física de sistemas de muitos corpos [6, 18, 19, 20]. Mais especificamente, os resultados de Shepelyansky, que estudou duas partículas interagentes em cadeias com desordem composicional, indicam que a interação entre os elétrons iria sempre promover um enfraquecimento na localização de Anderson[17]. Entretanto, resultados mais recentes mostram uma dependência não monotônica da localização das partículas em respeito à interação entre elas[21]. Este comportamento é associado à competição entre estados ligados e não ligados presentes no sistema. Tais resultados têm apresentado concordância com outros trabalhos que abordam as propriedades de transporte em sistemas em que a interação entre as partículas e a desordem coexistem[22, 23, 24, 25]. Além disso, esse modelo de baixa densidade eletrônica também foi utilizado para resolver um sistema bidimensional de desordem composicional no trabalho de Stellin e Orso, onde também é observado o caráter não monotônico da interação na localização de Anderson[26].

Nesse cenário, apresentamos aqui nossos estudos sobre o enfraquecimento da localização de Anderson promovido pela interação. Em nosso modelo, diferentemente da proposta de Dias e Lyra[21] que estudam a desordem composicional, tratamos duas partículas interagentes em cadeias com desordem estrutural. Com nossos resultados, esperamos estender a caracterização do comportamento da localização de Anderson em relação à interação entre as partículas[27].

Além disso, fenômenos interessantes surgem a partir da coexistência de interação

entre as partículas e campo elétrico contínuo, o que têm estimulado estudos tanto teóricos quanto experimentais[28, 29, 30, 31, 32, 33]. De maneira geral, podemos dizer que a interação elétron-elétron em sistemas de muitos corpos atua destrutivamente sobre as oscilações de Bloch[34]. Entretanto, para sistemas de baixa densidade em uma cadeia sujeita a um campo elétrico externo, foi demonstrado o comportamento oposto. O trabalho de W. Dias e colaboradores previu teoricamente que o centróide do pacote de onda pode apresentar um comportamento oscilatório com uma frequência predominante do dobro da frequência das oscilações de Bloch[28]. Esse dobramento foi posteriormente confirmado experimentalmente utilizando átomos bosônicos interagentes ultrafrios[33].

Motivados por esses resultados que contrapõem a fenomenologia de sistemas de muitos corpos, investigamos as oscilações de Bloch sob influência de um novo elemento no sistema: a interação coulombiana não-local, que surge ao assumirmos que a blindagem no potencial eletrônico é amortecida ao termos os elétrons em sítios vizinhos.

Visando uma melhor compreensão, estruturamos o texto desta presente dissertação da seguinte maneira: no capítulo 2 apresentamos os modelos de condução citados. Começaremos explicando o modelo de Bloch, revisando brevemente conceitos importantes da estrutura periódica e mostraremos o surgimento da estrutura de bandas. Em seguida, veremos o modelo de Anderson, que explica o comportamento isolante a partir da localização de Anderson – que pode ser entendida como a interferência destrutiva de ondas eletrônicas espalhadas em um potencial aleatório. Veremos também como a teoria de escala relacionou a transição metal-isolante à dimensão do sistema. Estudaremos, em seguida, a interação elétron-elétron e, por conseguinte, os isolantes de Mott. Mostraremos que o comportamento isolante para este caso surge por causa do grande custo energético de ocupação dupla no sítio. Apresentaremos o hamiltoniano de Hubbard, que descreveu os isolantes de Mott e, finalmente, o modelo de interação entre dois elétrons em potencial desordenado proposto por Shepelyansky.

O capítulo 3 foi destinado aos estudos específicos sobre a influência da interação entre os elétrons na localização de Anderson. Iniciamos revisando aspectos presentes no caso cristalino (sem desordem)[35], como também o caso com desordem composicional[21]. A reprodução dos resultados dão suporte válido para o nosso código computacional, utilizado na investigação sobre a influência da interação na localização promovida pela desordem estrutural mostrada no fim do capítulo.

No capítulo 4 apresentaremos a discussão sobre a influência da interação não-local na localização dinâmica induzida pela influência de um campo elétrico. Iniciamos discutindo as oscilações de Bloch para elétrons não interagentes bem como a influência da interação entre elétrons sobre esta fenomenologia. Revisamos também estudos da literatura que contemplam a interação não-local, mas na ausência de campo elétrico externo, Com a reprodução de alguns resultados em ambos os temas, validamos o nosso código computacional utilizado para a investigação da influência da interação não-local sobre as oscilações de Bloch para duas partículas interagentes.

Por fim, no quinto capítulo, apresentaremos as conclusões desta dissertação e suas perspectivas futuras.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Desde o fim do século XVIII, com a descoberta do elétron por J. J. Thomson[36], os físicos constroem modelos do estado metálico para explicar as características metálicas. Paul Drude propôs em 1900, três anos após a descoberta do elétron, uma analogia ao gás clássico para os metais[37, 38]. Em seu modelo, os metais seriam gases de elétrons que colidiam com íons fixos distribuídos aleatoriamente. Desprezou a interação dos elétrons com os íons (aproximação do elétron livre) e a interação entre os elétrons (aproximação do elétron independente). O modelo foi um grande sucesso por derivar a lei de Wiedemann-Franz, mas o uso da mecânica clássica trouxe alguns problemas, por exemplo, uma previsão errada para o calor específico e a falta de explicação para o campo termoelétrico.

Arnold Sommerfeld, em 1927, melhorou o modelo de Drude ao usar conceitos de mecânica quântica. Reconhecendo que os elétrons são férmions e, portanto, obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, substituiu a distribuição de Maxwell-Boltzmann² utilizada por Drude pela de Fermi-Dirac³. O gás ainda era formado por elétrons livres e independentes que colidiam com os íons, mas com o uso da mecânica quântica Sommerfeld conseguiu resolver alguns problemas do modelo antecessor e obteve uma melhor descrição para o calor específico. No entanto, outras previsões não estavam de acordo com resultados experimentais como alguns coeficientes de transporte do elétron livre (por exemplo, o coeficiente Hall) e para as previsões da termodinâmica estatística. Além disso, deixava questões fundamentais em aberto, não explicando, por exemplo, o caráter isolante e metálico dos materiais.

Todavia, diferentemente do que consideraram os modelos acima, os íons não são distribuídos aleatoriamente⁴, e sim em uma estrutura regular que chamamos de rede. Essa estrutura foi pensada há muito tempo para explicar as regularidades macroscópicas dos

²Como em um gás monoatômico clássico de densidade volumétrica $n = N/V$ em equilíbrio a uma temperatura T , o número de elétrons por unidade de volume com velocidades próximas a \vec{v} é

$$f_{MB}(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{(-mv^2/2k_B T)}.$$

³O número de elétrons por unidade de volume com velocidades próximas a \vec{v} se torna

$$f_{FD}(\vec{v}) = \frac{(m/\hbar)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp\{(mv^2/2 - k_B T_0)/k_B T\} + 1}$$

sendo T_0 a temperatura determinada pela condição de normalização $n = \int d\vec{v} f(\vec{v})$.

⁴Ademais, os íons não são fixos como Drude e Sommerfeld pensaram em seus modelos. Eles se movem em torno de posições de equilíbrio, mas esse movimento não será alvo de estudo do nosso trabalho.

cristais e recebeu sua primeira confirmação experimental em 1913 no trabalho de W. e L. Bragg com a difração do raio-X[39].

Assim, metais, ao contrário do que muitos podem pensar por serem maleáveis, são cristalinos. O verdadeiro teste de cristalinidade não é a aparência superficial, mas se seus íons se organizam de forma periódica ou não. A existência de uma rede periódica de íons é o coração da física do estado sólido moderna e foi F. Bloch quem propôs o primeiro modelo de condução que levasse em consideração essa organização periódica dos íons.

2.1 Modelo de Bloch

Bloch, em seu modelo, levou em conta a rede periódica dos materiais e o caráter ondulatório do elétron. A partir de seu modelo muitas anormalidades da teoria do elétron livre – de Drude e de Sommerfeld – são removidas e seus mistérios, em grande parte, resolvidos. Bloch foi o primeiro que conseguiu propor uma explicação para o comportamento isolante e condutor de alguns materiais por meio da teoria de bandas. Primeiramente vamos entender essas estruturas para que possamos investigar a teoria dos sólidos e suas conduções.

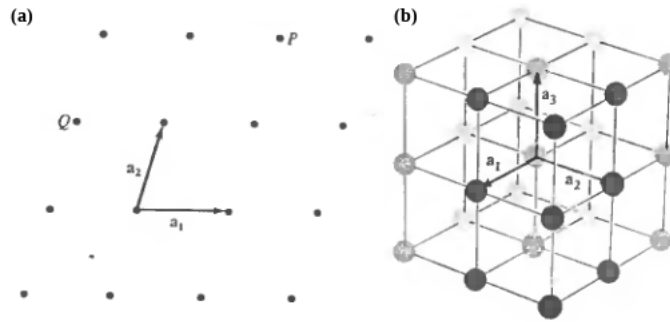
2.1.1 Rede Cristalina

A estrutura dos íons é determinada pela rede de Bravais que descreve a geometria da estrutura periódica de unidades do cristal, isto é, especifica o arranjo periódico no qual as unidades do cristal se repetem. Essas unidades podem ser átomos únicos, grupos de átomos, moléculas, íons, etc. A rede de Bravais são infinitos vetores de pontos discretos, que são as unidades do cristal, iguais não importa qual ponto é observado. Uma rede de Bravais tridimensional é composta por todos os pontos com vetores \vec{R} da forma

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (1)$$

de modo que \vec{a}_i são os vetores primitivos que geram a rede, podendo ser quaisquer três vetores não coplanares, e n_i são valores inteiros. A figura 1 ilustra redes quaisquer em duas e três dimensões. Os pontos são as unidades do cristal que se repetem na mesma estrutura, de modo que os vetores primitivos terão a mesma forma não importa a partir de qual ponto da rede se desenhe eles.

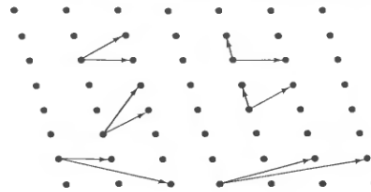
Figura 1: Redes de Bravais (a) bidimensional e (b) tridimensional.



Fonte: Ashcroft e Mermin (referência [40]).

A figura 2 mostra vários conjuntos de vetores primitivos para uma dada rede de Bravais, mostrando assim que o conjunto de vetores primitivos não é único - de fato, existem inúmeras escolhas possíveis para descrever a rede.

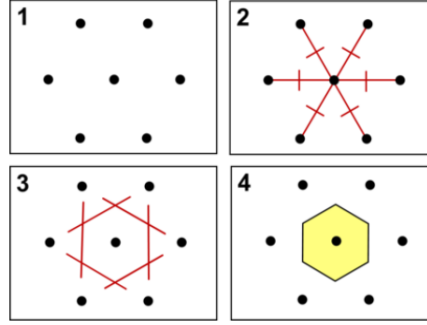
Figura 2: Possíveis opções de vetores primitivos de uma rede de Bravais bidimensional.



Fonte: Ashcroft e Mermin (referência [40]).

Podemos dividir a rede de Bravais em um volume que, quando transladado por todos os vetores da rede, preenche todo o espaço sem que haja sobreposição ou vacâncias. Esses volumes são chamados de células primitivas e não existe maneira única de definir essas células, mas uma escolha interessante é a célula primitiva de Wigner-Seitz. Esta célula é desenhada a partir do poliedro formado ao traçar ao meio as linhas que conectam um ponto aos seus vizinhos. A figura 3 mostra como é essa construção:

Figura 3: Construção da célula de Wigner-Seitz para uma de Bravais bidimensional.



Fonte: W. Dias, 2017 (referência [41]).

A partir da rede de Bravais podemos definir sua rede recíproca, que é muito importante para os estudos das estruturas periódicas. A rede recíproca é o conjunto de todos os vetores \vec{K} que geram ondas planas com periodicidade de uma rede de Bravais, ou seja,

$$e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \quad (2)$$

$$\Rightarrow e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1, \quad (3)$$

de modo que os vetores da rede recíproca são perpendiculares ao da rede de Bravais.

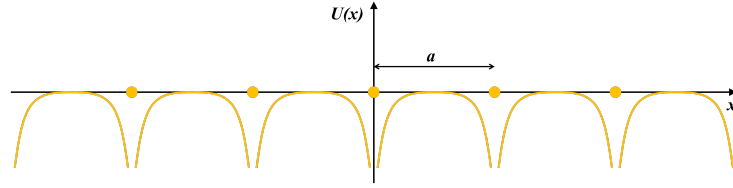
Podemos construir a célula primitiva de Wigner-Seitz do espaço recíproco – conhecida como primeira zona de Brillouin. Como veremos mais adiante, o fato dela carregar a simetria de translação da rede recíproca faz com que as ondas de Bloch sejam completamente caracterizadas na primeira zona de Brillouin.

2.1.2 Teorema de Bloch

Bloch levou em conta a estrutura periódica da rede cristalina e a interação dos elétrons com os íons da rede por meio de um potencial periódico[2]: os íons de um cristal perfeito são organizados periodicamente e regularmente, então o elétron estará submetido à um potencial que tem a periodicidade da rede de Bravais \vec{R} , como está representado na figura 4:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}) \quad (4)$$

Figura 4: Potencial periódico para um cristal unidimensional com vetor da rede de Bravais \vec{a} .



Fonte: Autora, 2020.

A aproximação de elétrons independentes usada por Bloch faz com que o hamiltoniano do sólido seja escrito por um potencial efetivo $U(\vec{r})$. Vamos examinar as propriedades gerais do modelo de um elétron, isto é, vamos resolver a equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (5)$$

Por causa da periodicidade da rede, vemos que a função de onda eletrônica tem soluções da forma

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (6)$$

onde $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função com periodicidade da rede de Bravais. Essa equação é conhecida como teorema de Bloch (ou de Floquet) e também pode ser apresentada na seguinte forma (demonstração no anexo A): os autoestados do hamiltoniano podem ser escolhidos de modo que, associado à cada ψ , tem um vetor de onda \vec{k} tal que

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi(\vec{r}). \quad (7)$$

Observe que a amplitude de probabilidade da onda de Bloch contém a periodicidade da rede, isto é, se estende por toda a rede. Essa característica revela o caráter metálico do sistema, que discutiremos mais a fundo posteriormente.

Atribuímos n ao nível de energia e o vetor de onda de Bloch \vec{k} carrega a informação da onda do elétron modificada pelo potencial da rede e pode sempre ser confinado na primeira zona de Brillouin, pois qualquer \vec{k}' que não esteja na primeira zona de Brillouin pode ser escrito como

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K} \quad (8)$$

onde \vec{K} é o vetor da rede recíproca e \vec{k} está na primeira zona de Brillouin. Isso se deve ao fato de que $e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1$ (eq. 3) e, assim, todas as funções de onda e níveis de energia para vetores de onda que diferem de \vec{K} (como \vec{k}' e \vec{k} na equação acima) são iguais:

$$\psi_{n,\vec{k}+\vec{K}}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (9)$$

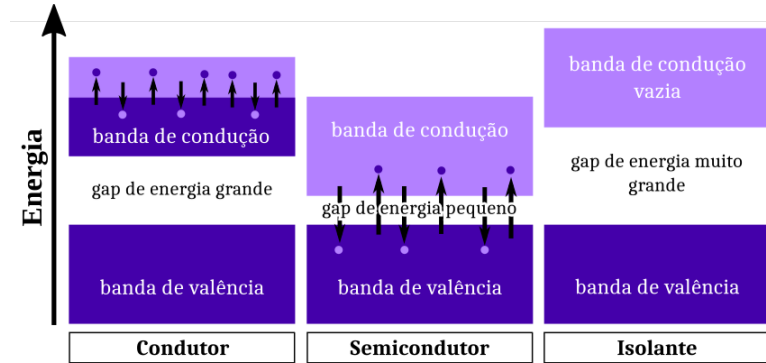
$$E_n(\vec{k} + \vec{K}) = E_n(\vec{k}) \quad (10)$$

Vemos que toda a informação da rede de Bravais está contida na primeira zona de Brillouin. Assim, descrevemos os níveis de energia do elétron submetido à um potencial periódico em termos de uma família de funções contínuas $E_n(\vec{k})$ que possuem periodicidade da rede recíproca e limite superior e inferior. Para cada n , o conjunto de níveis eletrônicos especificados por $E_n(\vec{k})$ é chamado de banda de energia. Para amostras macroscópicas esses níveis são muito próximos e o espectro de energia é considerado contínuo.

O estado fundamental de N elétrons de Bloch tem os níveis descritos pelos números quânticos n e \vec{k} e a energia, por $E_n(\vec{k})$. O vetor de onda de Bloch tem que estar confinado à uma única célula primitiva da rede recíproca se cada nível será contado apenas uma vez.

Quando os níveis forem preenchidos pelos elétrons, podemos ter dois tipos de configurações para a última banda preenchida. Na primeira, a última banda pode estar completamente cheia – sendo a diferença de energia entre o maior nível ocupado e o menor desocupado chamado de *gap* de energia; na segunda, ela pode estar parcialmente preenchida. Portanto, a partir do surgimento de bandas de energia proibidas devido à estrutura periódica do cristal, Bloch explicou a questão deixada em aberta pelo modelo de Sommerfeld: a diferença entre condutores, semicondutores e isolantes.

Figura 5: Representação da estrutura de bandas para material condutor, semiconductor e isolante a partir do custo energético para os elétrons transitarem entre os níveis.



Fonte: School Physics (referência [42]).

A descrição anterior pode ser melhor entendida através da representação gráfica apresentada na figura 5. Os condutores têm a banda de valência cheia de elétrons e a banda de condução com alguns elétrons livres e muitos níveis de energia vazios (ou uma sobreposição dessas duas bandas), de modo que a adição de pouca energia permite os elétrons se moverem na banda de condução, alguns subindo para níveis maiores e outros descendo para níveis mais baixos. Esse movimento entre os níveis é a condução elétrica.

Os isolantes, por outro lado, são os materiais que têm a banda de valência totalmente preenchida e um *gap* de energia muito grande entre ela e a banda de condução – que está vazia – sendo necessária uma grande quantidade de energia para excitar os elétrons. Já os semicondutores têm um *gap* de energia muito pequeno, de modo que os elétrons mais energéticos podem ser excitados para níveis de energia superiores com energia térmica ou uma energia luminosa de um comprimento de onda adequado.

2.1.3 Caso Unidimensional

Além do estudo analítico, podemos realizar também um estudo numérico do sistema. Por simplicidade, traremos aqui o caso unidimensional. Para analisar como se comporta o elétron de Bloch na rede vamos escrever computacionalmente (utilizando a linguagem FORTRAN) o hamiltoniano do modelo, que pode ser descrito através da segunda quantização:

$$H = \epsilon \sum_n c_n^\dagger c_n + J \sum_{\langle n,m \rangle} c_n^\dagger c_m, \quad (11)$$

sendo ϵ a energia de acoplamento do elétron com o sítio n , J a energia de *hopping* entre os pares de primeiros vizinhos $\langle n, m \rangle$ que representa o movimento do elétron para seus vizinhos, isto é, a energia cinética dos elétrons e, finalmente, c e c^\dagger os operadores de aniquilação e criação, respectivamente. Como a rede é cristalina, as energias ϵ e J são constantes por toda a rede.

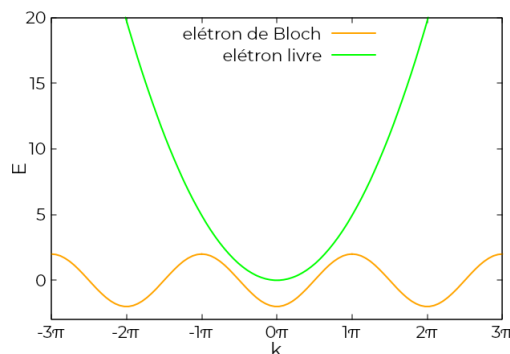
Aplicamos o hamiltoniano na equação de Schrödinger independente do tempo

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (12)$$

e a resolvemos analiticamente para ter uma idéia de como é a curva das energias da onda de Bloch. Demonstramos, em detalhes no apêndice B, que $E = \epsilon - 2J \cos(ka)$ (eq. 88), onde a é o vetor unitário da rede. Logo, podemos perceber que as energias de Bloch são periódicas no espaço recíproco k . A energia potencial de acoplamento ϵ desloca os valores de energia, enquanto que a amplitude das energias é regida pelo termo cinético J .

A energia de elétrons livres, por outro lado, depende quadraticamente do vetor de onda, ou melhor, $E = p^2/2m$. Assim, diferentemente dos elétrons de Bloch, os elétrons livres não possuem uma periodicidade nos valores de energia e acessam uma distribuição contínua de energia. Para compararmos melhor como se comportam as autoenergias desses dois sistemas distintos, desenhamos a curva delas na figura abaixo considerando $a = \hbar = m = 1 = J$ e $\epsilon = 0$:

Figura 6: Energia para elétrons livres (curva verde) e elétrons de Bloch (curva laranja) em função do vetor de onda k .



Fonte: Autora, 2020.

Observamos, conforme o discutido anteriormente, que todos os valores de energia permitidos para o elétron de Bloch estão contidos na primeira zona de Brillouin, que está

entre $[-\pi a, \pi a]$. Com isso, temos que o vetor da rede recíproca é $K = 2\pi/a$. Além disso, é possível obtermos valores de energia negativos para os elétrons na rede.

Em contrapartida, temos que a energia dos elétrons livres é sempre positiva e cresce com o quadrado do vetor de onda. Conforme o esperado, ela não possui periodicidade e acessa energias cada vez maiores com o aumento do vetor de onda, diferentemente dos elétrons de Bloch, cuja energia é periódica e possui limites superior e inferior.

Resolvemos agora numericamente a equação secular, $[\det(H - EI) = 0]$, obtida pela equação 12 utilizando as bibliotecas **BLAS** e **LAPACK**. Calculamos então a densidade de estados e a participação para uma cadeia de 1000 sítios, onde a energia de *hopping* é $J = 1$ e a energia potencial, $\epsilon = 0$. A partir dos autoestados do hamiltoniano, computamos duas quantidades físicas. A densidade de estados, que nos dá o número de estados eletrônicos de um certo nível de energia que os elétrons podem ocupar

$$DE = \frac{1}{N} \sum_l \delta(E - E_l), \quad (13)$$

e a participação, que fornece a medida da porção do espaço onde a amplitude da função de onda difere significativamente de zero

$$P = \frac{\sum_n |\varphi_n|^2}{\sum_n |\varphi_n|^4} \quad (14)$$

Analisando a participação, considerando que os estados estão normalizados, isto é, que $\sum_n |\varphi_n|^2 = 1$, temos que as amplitudes de probabilidade para um sistema de tamanho de cadeia N caracterizado por estados estendidos, ou seja, para uma cadeia pura, é $|\varphi_n|^2 = N^{-1}$. Dessa forma, a participação é proporcional ao tamanho da cadeia, uma vez que $P = N^{-1}/N^{-2} = N$.⁵

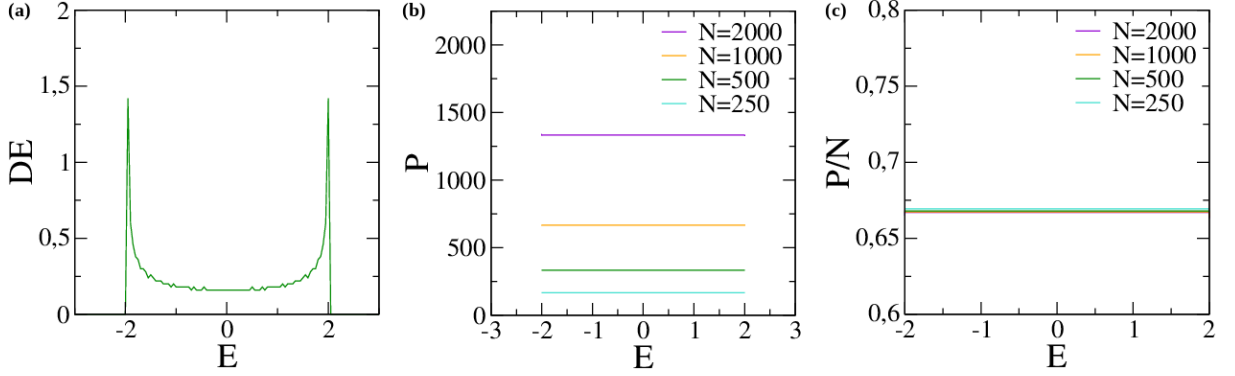
Na figura 7(a) fizemos o gráfico da densidade de estados pela energia para uma cadeia de 1000 sítios. Neste gráfico observamos que a maior quantidade de estados está nas extremidades da banda, onde temos singularidades de van Hove. Com isso, a função de onda eletrônica pode assumir um maior número de estados nos extremos da banda, outro indicativo de que a função de onda de Bloch se estende por toda a rede.

Na figura 7(b), por sua vez, desenhamos o gráfico da participação para diferentes tamanhos de cadeia N e vemos que a participação aumenta com o crescimento da cadeia.

⁵É interessante comentar o outro limite: o caso em que a função de onda está localizada em apenas um sítio, i.e., $\varphi_n = \delta_{n_i} \Rightarrow P = 1$.

Observamos também que a energia está delimitada ao intervalo $[-2, 2]$, conforme previsto analiticamente (apêndice B).

Figura 7: (a) Densidade de estados para rede cristalina de 1000 sítios; (b) participação e (c) participação dividida por N para diferentes tamanhos de cadeia.



Fonte: Autora, 2020.

Para melhor enxergar a relação da participação com o tamanho da cadeia, fizemos o gráfico da fig. 7(c) que é a participação escalada com N . O gráfico nos mostra que as funções de onda são proporcionais à N , como o esperado para funções de onda estendidas, uma vez que colapsam no mesmo resultado, $P \approx 6,66$. Esse valor é esperado uma vez que a amplitude das funções de onda estacionárias é proporcional à $\cos(kr)$, resultando em $P = 2N/3$ [43]⁶. Nosso resultado está de acordo com a literatura, portanto o gráfico característico valida o nosso código computacional.

O grande sucesso do modelo de Bloch foi levar em consideração a interação dos íons, descrevendo o material como uma rede perfeitamente cristalina, periódica. Mas isso é uma idealização. Na natureza não existem sólidos perfeitamente cristalinos: sempre existem imperfeições e nas vizinhanças de átomos imperfeitos o sólido não é exatamente o mesmo que no resto do cristal. Além disso, a temperatura altera a estrutura: existe uma

⁶Se considerarmos, por simplicidade, $\varphi_n = \cos(x) = \varphi(x)$, e que o sistema possui muitas partículas, a função participação na forma integral é

$$P = \frac{\left[\int_0^N |\cos(x)|^2 \right]^2}{\int_0^N |\cos(x)|^4} = \frac{[(N + \cos N \sin N)/2]^2}{[12N + 8\sin(2N) + \sin(4N)]/32} = \frac{32}{4} \frac{(N^2 + 2N \cos N \sin N + \cos^2 N \sin^2 N)}{12N + 8\sin(2N) + \sin(4N)}$$

Dessa forma, tomando o limite, temos

$$P_{N \rightarrow \infty} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1 + \frac{2 \cos N \sin N}{N} + \left(\frac{\cos N \sin N}{N} \right)^2}{12 + \frac{8\sin(2N) + \sin(4N)}{N}} \frac{32N}{4} = \frac{2N}{3}.$$

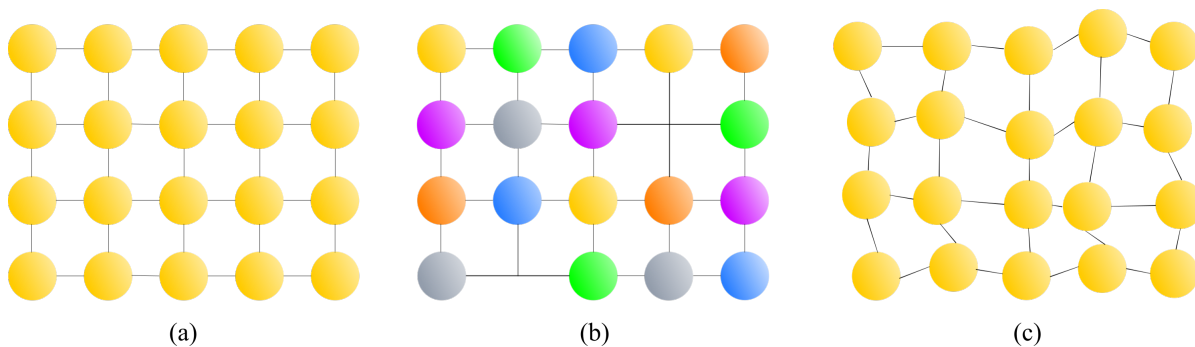
probabilidade dependente dela de achar íons faltando ou fora de lugar e os íons sofrem vibrações térmicas em torno de suas posições de equilíbrio. Esses elementos são muito importantes: são os responsáveis, por exemplo, pela condutividade elétrica de metais não ser infinita.

Neste trabalho estudaremos os efeitos na condutividade dos materiais causados pelas imperfeições na estrutura ou na composição da rede cristalina do sólido, também conhecidas como desordem, remetendo à novas considerações sobre o comportamento da função de onda, como veremos a seguir.

2.2 Desordem e o Modelo de Anderson

Philip W. Anderson, em 1958, formulou um modelo que descreve as imperfeições nas redes[3]. Mostrou que a desordem poderia fazer com que a função de onda não mais se estendesse sobre toda a rede como acontecia para o elétron de Bloch, surgindo a existência de caráter isolante no material. Chamamos esses materiais de isolantes de Anderson. Seu modelo foi pensado para o elétron, mas funcionou para várias ondas⁷, por exemplo, ondas acústicas[44], eletromagnéticas[45], de matéria[46, 47] e excitações coletivas[48, 49].

Figura 8: Estruturas (a) cristalina perfeita e com desordens (b) composicional e (c) estrutural.



Fonte: Autora, 2019.

A desordem é o elemento que acrescenta imperfeições à cadeia e pode ser caracterizada como estrutural ou composicional, como esquematizado na figura 8. Consideramos de forma simplificada que a desordem no termo de acoplamento do elétron ao sítio como uma desordem representada por íons diferentes – o que chamamos de desordem composi-

⁷Esse é um fator importante para o sucesso de sua teoria, que lhe rendeu o Nobel de Física em 1977.

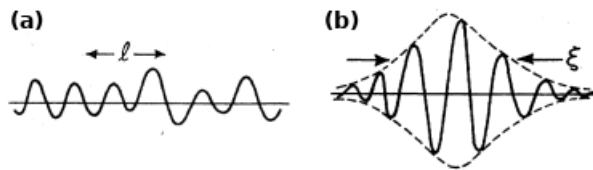
cional, enquanto que a desordem no termo de *hopping* representa íons que estão espaçados de modo diferente – chamada de desordem estrutural.

Esses cenários, no entanto, são aproximativos, pois íons diferentes devem apresentar eletrosferas diferentes e, portanto, a sobreposição deles causaria perturbações no termo de *hopping*. De modo semelhante, ao termos espaçamentos diferentes entre os íons, as sobreposições das eletrosferas seriam diferentes causando uma blindagem eletrônica diferente, o que perturbaria a energia de acoplamento do elétron. Por simplicidade, no entanto, podemos assumir que essas perturbações são desprezíveis.

Nesta abordagem, uma quantidade relevante é a largura da desordem W , de modo que quanto mais desordenado for o material, maior é W . Em termos práticos, a largura de desordem delimita a largura de valores possíveis para o termo de *hopping* (desordem estrutural) ou de energia *onsite* (desordem composicional).

Vimos na figura 7 que a função de onda do modelo de Bloch se estende sobre toda a rede. Anderson, em seu artigo[3], simulou a desordem composicional, isto é, no termo de acoplamento ε_i . Observou que, dependendo do grau de desordem, a função de onda não mais se estendia. Para um grau pequeno de desordem a função de onda continua estendida, porém sem coerência de fase sobre o comprimento de escala do livre caminho médio. Essa configuração está representada na figura 9(a). Para graus suficientemente altos surgiria o isolante de Anderson e a função de onda passa a estar concentrada apenas em uma região composta de alguns átomos da rede, como pode ser visto na figura 9(b). O envelope da função de onda decai exponencialmente no espaço, ou seja, $\psi(\vec{r}) \sim \exp\{-(\vec{r} - \vec{r}')/\xi\}$, onde ξ é o comprimento da localização. Esse comportamento é conhecido como localização de Anderson e pode ser entendida como o dispersão das ondas de Bloch no potencial aleatório[41].

Figura 9: Típicas funções de ondas de estados (a) estendidos com livre caminho médio l e (b) localizados com comprimento de localização ξ .



Fonte: P.A. Lee, 1985 (referência [50]).

O modelo de Anderson descreve uma transição metal-isolante governada pela razão

entre a largura da desordem e o termo de *hopping* W/J : se $W = 0$, a função de onda está estendida e recuperamos o modelo de Bloch; se $J_{nm} = 0$, os sítios não estão conectados entre si e a função de onda está localizada. Por conseguinte, temos um ponto crítico governado pela razão W/J .

Contudo, Mott e Twose sugeriram que a transição dependia da dimensão do sistema[51]. Observaram que existia localização no caso unidimensional para qualquer grau de desordem. Mott propôs o conceito de energia crítica E_c (*mobility edge*) para a transição de um estado localizado para um estendido, de modo que a condutividade σ seria

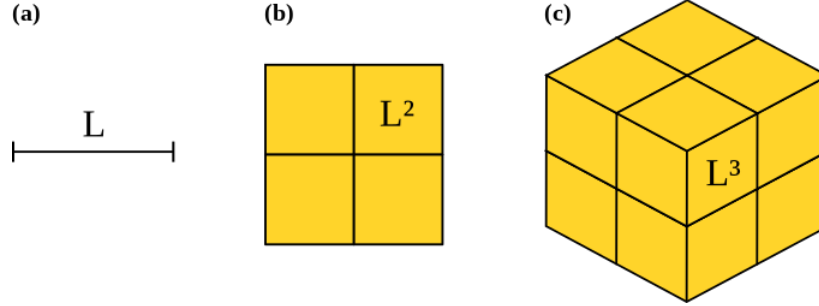
$$\begin{cases} \sigma(E) = 0 & E_F < E_c \\ \sigma(E) > 0 & E_F > E_c \end{cases} \quad (15)$$

Mas descrever as propriedades do sistema perto do ponto de transição metal-isolante é difícil, então D.J. Thouless fez analogia com transição de fase[43]. O modelo de Thouless foi a base da teoria de escala da localização que apresenta uma dependência da transição com a dimensão do sistema. Veremos a seguir como é esta dependência.

2.2.1 Teoria de Escala da Localização

Em 1979, baseado no artigo de Thouless, o quarteto Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan apresentou uma análise de escala que expõe a relação entre a transição metal-isolante e a dimensão do sistema[5]. Thouless construiu um sólido de volume $(2L)^d$ e de d dimensões compondo o volume total com pequenos blocos de volume L^d , conforme está representado na figura 10:

Figura 10: Construção de amostras (a) unidimensional, (b) bidimensional e (c) tridimensional a partir de blocos.



Fonte: Autora, 2020.

Thouless investigou a relação entre as propriedades do material inteiro e as propriedades dos blocos, supondo que as propriedades do cristal seriam ditadas pelas propriedades dos blocos. Notou que a condutância G de um bloco é uma quantidade adimensional, introduzindo a condutância adimensional abaixo

$$g(L) = \frac{G(L)}{e^2/\hbar} \quad (16)$$

Essa condutância $g(L)$ tem duas formas assintóticas bem diferentes para um metal muito grande, isto é, para um bloco muito maior do que o livre caminho l ($L \gg l$), dependendo do grau da desordem microscópica. Quando o potencial aleatório é pequeno, a função de onda do elétron é estendida e se aproxima de uma onda plana. A condutividade σ é intensiva, isto é, independente do tamanho de escala L , e a condutância é inversamente proporcional à resistência. Para um metal muito grande, a lei de Ohm nos diz que a condutância de um hipercubo é

$$g(L) = \sigma L^{(d-2)} \quad (17)$$

Se estados perto da energia de Fermi ε_F são localizados, no entanto, o transporte ocorre através do *hopping* do elétron do estado ocupado para um estado não ocupado de, aproximadamente, mesma energia. Mas estados localizados muito próximos em energia são muito afastados no espaço, então o elemento da matriz de *hopping* entre eles é exponencialmente pequeno. Assim, o comprimento de localização ξ é a escala de comprimento relevante, pois geralmente é maior do que o livre caminho médio. É esperado que nesse regime ($L \gg \xi$)

$$g(L) \propto \exp\{-L/\xi\} \quad (18)$$

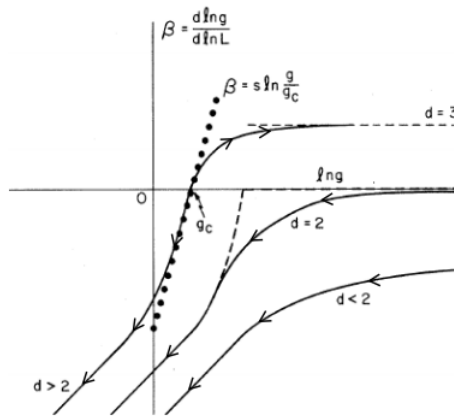
que é uma dependência de escala não-ôhmica[50].

Na teoria de escala se tenta entender a localização considerando o comportamento da condutância $g(L)$ como função do tamanho do sistema L , isto é, descrever como $g(L)$ muda com L para todo $L > l$ em várias dimensões[41]. Para fazer essa análise, Abrahams *et al.*[5] proporam a derivada logarítmica $\beta(g)$, uma função apenas da condutância:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (19)$$

A equação acima nos mostra que quando a função β for positiva, $\beta > 0$, a condutância do material g cresce com o crescimento do tamanho do bloco L , e, quando negativa, $\beta < 0$, a condutância diminui com o aumento de L . O comportamento qualitativo da função de escala em termos da condutância adimensional para os casos de dimensão $d = 1, 2, 3$ estão na figura 11. Discutiremos como a função se comporta nos regimes de grande e pouca condutância, ou seja, $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$ respectivamente, e com isso definimos uma condutância crítica g_c , tal que $\beta(g_c) = 0$.

Figura 11: Função de escala $\beta(g)$ para diferentes dimensões.



Fonte: Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishman, 1979 (referência [5]).

No primeiro regime, quando $g \rightarrow \infty$ ou $g \gg g_c$, temos a expressão para a condutância dada pela equação 17. Logo, a função de escala se torna uma reta de valor constante dependendo da dimensão:

$$\beta(g \rightarrow \infty) = d - 2 \quad (20)$$

Na equação 21 temos as assíntotas para $d = 1, 2, 3$ que podem ser vistas na figura 11.

$$\beta(g \rightarrow \infty) = \begin{cases} +1, & d = 3 \\ 0, & d = 2 \\ -1, & d = 1 \end{cases} \quad (21)$$

Já no segundo regime, quando $g \rightarrow 0$ ou $g \ll g_c$, a condutância é dada por uma equação da forma da equação 18. Então, para um A independente de L ,

$$g(L) = A \exp\{-L/\xi\} \quad (22)$$

de modo que $\beta(g \rightarrow 0) = -L/\xi$, mas $\ln g = \ln A - L/\xi$, o que nos dá $\beta = \ln g - \ln A$; como $\beta(g_c) = 0 \Rightarrow A = g_c$ e obtemos a função de escala

$$\beta(g \rightarrow 0) = \ln \left(\frac{g}{g_c} \right) \quad (23)$$

que será sempre negativa, não importa a dimensão do cristal, exatamente como pode ser visto para as três curvas na figura 11.

Assim, a teoria de escala da localização mostra que todos os estados estão localizados para $d \leq 2$, não importando o grau de desordem, o que concorda com os resultados de Mott e Twose para o caso unidimensional[51]. Apenas para cristais de dimensão $d > 2$ podemos observar ambos estados localizados e estendidos. Teremos nesses casos um ponto crítico g_c que separa as regiões em que o material se comporta como isolante ($\beta < 0$) e como condutor ($\beta > 0$).

2.2.2 Caso Unidimensional

Semelhantemente ao que fizemos para o modelo de Bloch, vamos complementar o estudo analítico do modelo de Anderson por meio de um estudo numérico do sistema para o caso unidimensional. O hamiltoniano de Anderson na segunda quantização é dado por

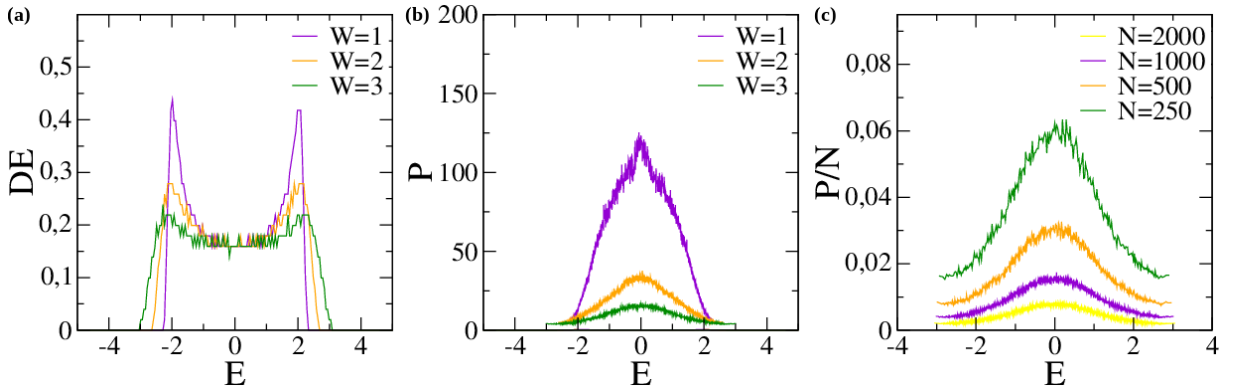
$$H = \sum_n \epsilon_n c_n^\dagger c_n + \sum_{\langle n,m \rangle} J_{nm} c_n^\dagger c_m \quad (24)$$

com a energia de acoplamento *on-site* ϵ_n podendo ser diferente para cada sítio n , assim como o termo de *hopping* J_{nm} entre os pares de primeiros vizinhos $\langle n, m \rangle$, que pode ser diferente para cada par.

Analizamos numericamente a desordem composicional. Nesse caso, assumimos que ϵ_n , do hamiltoniano escrito na equação 24, assumem valores aleatoriamente distribuídos no intervalo de W e a energia de *hopping*, $J_{nm} = 1$. Assim como fizemos para o modelo de Bloch, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo. Calculamos as já mencionadas densidade de estados (eq. 13) e participação (eq. 14) que estão na figura 12(a) e (b).

Usamos para as figuras 12(a) e (b) uma cadeia de 1000 sítios e 100 amostras, tomando diferentes larguras de desordem ($W = 1$, $W = 2$ e $W = 3$) para a energia de acoplamento ϵ_n – que assumiu valores no intervalo $[-W/2, W/2]$. Para a figura 12(c), mantivemos constante a largura da desordem ($W = 3$) e variamos o tamanho da cadeia N .

Figura 12: (a) Densidade de estados, (b) participação de rede composicionalmente desordenada de 1000 sítios para diferentes larguras de desordem W e (c) participação escalada com N para $W = 3$.



Fonte: Autora, 2020.

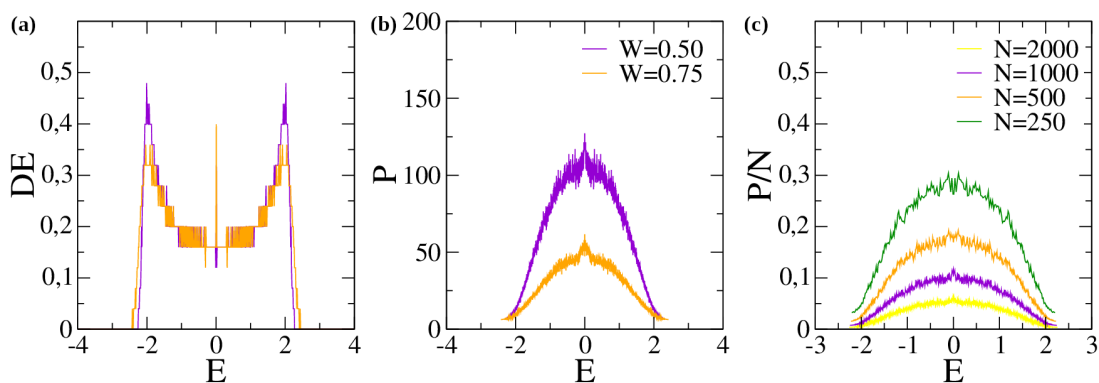
Na figura 12(a) as curvas são rugosas se comparadas com a densidade de estados de Bloch (figura 7). Além disso vemos que as singularidades de van Hove são suavizadas e desaparecem com o aumento da largura da desordem W . Acontece também um alargamento nos valores limites de energia, que é proporcional à largura da desordem.

A partir da figura 12(b), podemos notar que a participação é menor comparada com a da rede cristalina e que quanto maior a largura de desordem, menor ela é, no entanto, nunca chega a zero, o que era esperado de acordo com nossa análise da função feita anteriormente. Ademais, a participação para todos os valores de desordem não é mais constante, nos mostrando que os estados contidos nas extremidades da banda são mais localizados do que os no centro.

Comparando agora a figura 12(c), vemos que a participação não é proporcional ao tamanho da cadeia como acontecia para uma cadeia pura. Todos esses comportamentos descritos indicam que o sistema é governado por estados localizados[41]. Vemos então que, para todos os valores de desordem, as funções de onda estão localizadas, conforme previu a teoria de escala.

A fim de analisar a desordem estrutural, temos na figura 13(a) a densidade de estados e na 13(b) a participação para uma rede unidimensional de $N = 2000$ sítios com desordem no *hopping* – estrutural – considerando $J_{nm} = 1 + \Delta J$, sendo $-W/2 \leq \Delta J \leq W/2$. Na figura 13(c) é a participação escalada com o tamanho da cadeia para $W = 0.50$ com 100 amostras.

Figura 13: (a) Densidade de estados, (b) participação de rede estruturalmente desordenada de 2000 sítios para diferentes larguras de desordem W e (c) participação escalada com N para $W = 0.50$.



Fonte: Autora, 2020.

Podemos observar características semelhantes ao caso com desordem composicional: alargamento da banda; maior rugosidade na densidade de estados; valor de participação menor do que o caso cristalino; participação que não é constante e nem proporcional ao tamanho da cadeia, tendo seu máximo no centro da banda e seu mínimo nos extremos. Também notamos que esses comportamentos são acentuados com o aumento

da largura da desordem. Esses aspectos são característicos da presença de desordem no sistema e indicam que a função de onda está localizada, novamente concordando com a teoria de escala.

Ao comparar os dois casos desordenados, no entanto, observamos que a densidade de estados com desordem estrutural (fig. 13a) apresenta um comportamento anômalo no centro da banda. Notamos também que a participação (fig. 13b) possui amplitude um pouco menor do que no caso com desordem composicional, sugerindo que a maioria dos estados é mais localizada, o que é confirmado na participação escalada com o tamanho da cadeia que apresenta amplitudes muito menores do que a do caso com desordem no termo potencial.

A formulação inicial da teoria de escala dependia de argumentos fracos, mas recebeu suporte mais tarde da teoria de perturbação[5, 52, 53], se consolidando. No entanto, existem trabalhos posteriores investigando diferentes ingredientes que revelam comportamento não previsto pela teoria de escala, por exemplo, distribuição de desordem pseudo-aleatória ou correlacionada[54, 55, 56, 57].

Além disso, apesar de ser muito importante para explicar a transição metal-isolante, falhava em explicar como materiais com bandas parcialmente preenchidas, que deveriam ser condutores, se comportavam como isolantes. A explicação surgiu com o modelo de Mott e Hubbard, que mostraram que a forte repulsão sentida por um elétron em um sítio já ocupado também tem um papel importante para o estudo da transição, se fazendo necessário abandonar a aproximação do elétron independente.

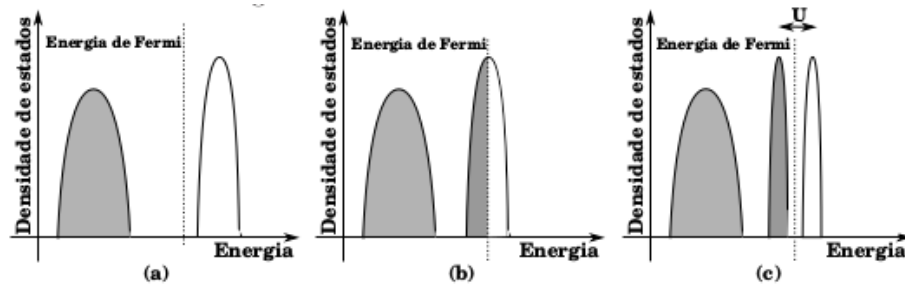
2.3 Modelo de Mott e Hubbard

Mott e Peierls, em 1937, publicaram um dos primeiros trabalhos sobre interação entre os elétrons e propuseram que esta era responsável pelo comportamento isolante de alguns óxidos de metais de transição[7]. Anos depois, em 1949, Mott apresentou um modelo capaz de explicar os resultados experimentais obtidos para esses metais[4]. Sugeriu que a formação de um *gap* de energia impedindo a condução surge devido à competição entre o potencial coulombiano e o *hopping* entre os átomos vizinhos.

Pela teoria de bandas, o material é isolante (ou semicondutor) se a energia de Fermi estiver em uma banda completamente preenchida e metálico se estiver em uma parcialmente preenchida como está reproduzido na figura 14 (a) e (b), respectivamente.

Mott, então, propôs que a interação entre os elétrons iria separar a banda parcialmente preenchida em duas sub-bandas, de modo que o nível de Fermi estaria localizado em um *gap*. Surge, assim, os isolantes de Mott, sendo a energia de interação elétron-elétron um parâmetro que determina se o sólido será isolante ou condutor.

Figura 14: Densidade de estados para (a) isolante; (b) condutor; (c) elétrons fracamente interagentes.



Fonte: W. S. Dias, 2011 (referência [34]).

Mott explicou o surgimento desse *gap* da seguinte maneira: se uma banda está completamente preenchida, vão existir poucos elétrons de condução, de modo que a probabilidade de um elétron de condução encontrar outro em um determinado sítio é pequena. Então o custo energético para ele ser adicionado ao íon é pequeno. Mas, se a banda está parcialmente preenchida, existem mais elétrons de condução, de modo que a probabilidade de um elétron de condução encontrar outro em um íon qualquer vai ser maior. Assim, maior é a repulsão coulombiana sofrida por ele. Dito de outra forma, o custo para adicionar um elétron em uma rede de bandas parcialmente preenchidas tem de ser aumentado em U , criando, assim, o *gap*.

Portanto, percebemos que quanto maior o custo de dupla ocupação de um sítio (dado pela interação coulombiana U), mais a propagação do elétron é inibida, fazendo com que o material se torne isolante. Assim, a transição de Mott é governada pela competição entre o termo cinético do elétron (a energia de *hopping*) e o termo de interação coulombiana.

Em 1964, J. Hubbard propôs um modelo que demonstrava a transição de Mott[10, 9, 8]. Em seu modelo, o conjunto dos níveis de elétrons ligados de cada íon é reduzido à um único nível orbital localizado. Os estados do modelo são dados especificando as quatro configurações possíveis de cada íon (seu nível pode estar vazio, com dois elétrons de spins opostos, com um elétron de spin *up* ou com um elétron de spin *down*).

O hamiltoniano do modelo tem dois tipos de termos: um diagonal, que contém a energia de acoplamento de um elétron ao sítio n (ϵ_n) mais a energia de natureza coulombiana U da interação entre os elétrons que estão no mesmo sítio; e um fora da diagonal, que tem elementos matriciais não nulos apenas entre aqueles pares de estados que representam um elétron que foi movido de um dado íon para um de seus vizinhos, o termo de *hopping* J_{nm} .

O modelo de Mott e Hubbard ganhou força por explicar resultados experimentais que não estavam de acordo com a teoria de bandas e de escala[58] e foi corroborado por muitos estudos experimentais[59, 60]. Mas ainda é bastante complicado para se fazer uma análise exata. O termo de interação entre os elétrons não é pequeno o suficiente para ser tratado usando a teoria da perturbação e é muito custoso computacionalmente, pois os estados eletrônicos aumentam exponencialmente com o número de partículas. Soluções exatas do modelo só são encontradas para o caso unidimensional[11, 12, 13].

Não obstante, muitas informações interessantes têm sido extraídas de casos especiais. Dentre elas, o modelo de baixa densidade com potencial desordenado tem se mostrado uma boa alternativa[17], pois é capaz de resgatar aspectos relevantes presentes em sistemas de muitas partículas interagente[6, 22]. Veremos a seguir uma descrição mais detalhada deste modelo.

2.4 Modelo de Baixa Densidade Eletrônica

Em 1994 D. L. Shepelyansky propôs um modelo de duas partículas interagentes em uma cadeia desordenada[17] na intenção de entender os resultados do experimento de anéis mesoscópicos metálicos[6] que iam de encontro com a teoria de escala da localização.

Na época não se tinha uma teoria satisfatória que explicasse o porquê de uma forte corrente persistente ser observada nesses anéis que, de acordo com a teoria da escala, deveriam se comportar como isolantes. E foi esse problema que motivou a necessidade de melhor entender os efeitos da interação em um potencial desordenado.

Em seu trabalho, Shepelyansky mostrou que a presença de interação de natureza coulombiana entre as partículas enfraquece a localização de Anderson induzida pela desordem. Sugeriu que existem estados de um novo tipo, nos quais as partículas estão a uma distância aproximadamente igual ao comprimento de localização de uma partícula ξ_1 uma da outra e propagam juntas coerentemente a uma distancia muito maior $l_c \gg \xi_1$.

Esse movimento coerente acontece até no caso em que a interação entre as partículas é repulsiva.

Para explicar esse fenômeno, argumentou que a presença de potencial aleatório impede as duas partículas repulsivas que foram postas originalmente próximas uma da outra de se afastarem a uma distância maior do que ξ_1 . Isto é, a localização força as partículas a ficarem juntas. Nesse estado acoplado, as partículas se movem uma com respeito a outra e isso pode aumentar a distância l_c na qual elas propagam juntas, se comparado à ξ_1 .

Shepelyansky sugere, então, que partículas repulsivas colocadas inicialmente próximas – com uma distância comparável ao comprimento de localização de uma partícula ξ_1 – propagarão coerentemente por uma distância l_c muito maior $l_c \gg \xi_1$. Existe, portanto, a competição entre o grau de desordem que faz as partículas propagarem coerentemente e a interação entre elas, que no nosso trabalho tem caráter repulsivo.

O trabalho relativamente simples de duas partículas interagentes em potencial desordenado permitiu entender e resgatar resultados experimentais envolvendo muitas partículas em anéis mesoscópicos metálicos[6, 18, 19, 20]. Esse foi o principal motivo que deu destaque ao trabalho, fazendo com que muitos pesquisadores investigassem a proposta e confirmassem o enfraquecimento devido à interação[61, 62, 63].

Motivados pela simplicidade e sucesso do modelo de Shepelyansky, muitos trabalhos surgiram para propor a relação de proporcionalidade entre a interação e o enfraquecimento, sempre expondo que o aumento na interação resulta em um aumento no enfraquecimento da localização[22, 23, 24, 25]. Shepelyansky, por exemplo, propôs em seu trabalho que o enfraquecimento seria proporcional à U^2 .

No entanto, trabalhos recentes que estudam a relação entre a desordem e a interação repulsiva entre as partículas em sistemas de muitos corpos mostram uma dependência não monotônica do enfraquecimento da localização em relação à interação[64, 15, 65].

Um trabalho de baixa densidade eletrônica escrito por W. Dias e M. Lyra mostrou que, na realidade, o enfraquecimento da localização de Anderson não acontece para qualquer valor de interação[21]. É sobre essa temática que discutiremos no próximo capítulo. Além de apresentar os estudos mais recentes que envolvem a investigação em uma rede unidimensional com desordem composicional (desordem no termo *on-site*), apresentare-

mos nossa investigação envolvendo uma rede unidimensional com desordem estrutural (desordem no termo de *hopping*).

No quarto capítulo consideramos o modelo de duas partículas interagentes sob ação de campo elétricos externos, amplamente investigado[66, 28, 31, 67, 33]. Acreditava-se inicialmente que a interação entre elétrons destruiria as oscilações de Bloch, originadas pela localização dinâmica. No entanto, trabalhos que investigam sistemas de baixa dimensionalidade têm mostrado que a interação promove o dobramento da frequência das oscilações de Bloch. Esse resultado foi previsto teoricamente por W. Dias, E. Nascimento, M. Lyra e F. de Moura[28] e foi posteriormente apoiado por experimento em átomos bosônicos ultrafrios[33].

Além de estudar, reproduzir e apresentar alguns resultados existentes na literatura, apresentaremos nossos estudos envolvendo o papel da interação não-local na dinâmica dos dois elétrons sob ação de um campo elétrico externo e constante alinhado paralelamente ao sentido da rede unidimensional.

3 INTERAÇÃO E LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON

Os isolantes de Anderson e de Mott que discutimos no capítulo anterior são bem conhecidos e estudados na literatura. No entanto, a localização de Anderson induzida pela desordem em sistemas de partículas interagentes – chamada de localização de muitos corpos[68] – é um tema de intensa investigação[69, 70, 71, 72, 73] e controvérsia, uma vez que ainda é um grande desafio na física da matéria condensada, tanto teoricamente quanto experimentalmente.

Trabalhar com esses dois elementos é extremamente difícil. Como discutido no capítulo anterior, ao abdicarmos da aproximação do elétron independente, o número de configurações do sistema cresce exponencialmente com a quantidade de partículas e só encontramos solução exata para esse problema em um sistema unidimensional[11, 12]. Além disso, a interação entre os elétrons não é pequena o suficiente para se tornar um parâmetro de uma expansão perturbativa. Por fim, trabalhar com desordem requer que várias configurações de desordem sejam simuladas, aumentando o custo computacional.

Tentativas foram feitas para resolver esse problema, como considerar que as interações apenas mudam as energias originais da diagonal[14] ou usar a técnica de *half-filling* (meio-preenchimento) que limita o tamanho do sistema. E. Gambet, por exemplo, estuda o efeito da interação de Hubbard e a localização de Anderson em um sistema unidimensional de 20 íons e 20 elétrons interagentes[74].

Dentro desse contexto, o modelo de baixa densidade eletrônica em uma rede unidimensional desordenada apresentado por Shepelyansky se mostra extremamente oportuno, pois consegue resgatar resultados experimentais a partir de um modelo relativamente simples[17, 21].

Como discutido no capítulo anterior, acreditava-se que a interação entre os elétrons enfraqueceria a localização de Anderson monotonicamente. No entanto, pesquisas recentes – tanto de baixa densidade[21] quanto de muitos corpos[64, 15, 65] – vêm mostrando que a interação enfraquece a localização apenas para valores pequenos de interação e , para valores grandes, possui o efeito oposto: fortalece a localização.

A fim de compreender as influências da desordem e da interação no sistema assim como validar nosso código computacional, começaremos reproduzindo resultados já conhecidos da literatura para, por fim, apresentarmos nossa investigação sobre a influência da interação na localização de Anderson promovida pela desordem estrutural.

3.1 Interação Elétron-Elétron em Rede Cristalina

Inicialmente vamos analisar o caso cristalino, já conhecido na literatura[35], a fim de entender o modelo e validar o código computacional desenvolvido. O hamiltoniano geral de Mott-Hubbard que descreve o sistema composto por dois elétrons interagentes é

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s \epsilon_n c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + \sum_{n=1}^N \sum_s J_{n'} \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \quad (25)$$

onde c e c^\dagger são os operadores de aniquilação e criação de um elétron com spin $s = \pm 1/2$, representados neste trabalho por $\{\uparrow, \downarrow\}$; a energia cinética é dada pelo termo de *hopping* $J_{n'}$, com n' sendo o índice do operador criação; a energia para um elétron acoplar no íon n é ϵ_n ; e a de interação coulombiana entre elétrons que ocupam o mesmo sítio está representada por U . Como iremos reproduzir o caso cristalino, assumimos $\epsilon_n = 0$ e $J_{n'} = 1$.

Note que, por conta do princípio de exclusão de Pauli, é necessário que os dois elétrons tenham *spins* opostos para que ocupem o mesmo sítio. Em nosso estudo sempre abordaremos o problema de dois elétrons distinguíveis pelo *spin*. Dessa forma, a parte espacial da função de onda é o produto das funções de onda de cada elétron $\varphi(\vec{r}_\uparrow, \vec{r}_\downarrow) = \varphi_\uparrow(\vec{r}_\uparrow)\varphi_\downarrow(\vec{r}_\downarrow)$. Em vista disso, podemos expandir a função de onda na representação de Wannier⁸

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_\uparrow} \sum_{n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \quad (26)$$

sendo n_\uparrow e n_\downarrow a posição dos elétrons de *spin up* e *down*, respectivamente[76]. Deste modo, o subespaço é gerado por N^2 funções de ondas, ou seja, nosso espaço de Hilbert⁹ tem dimensão N^2 .

Resolvemos, então, a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12) por meio da equação secular $[\det(H - EI) = 0]$. Utilizando o hamiltoniano de Mott-Hubbard (eq. 25), preenchamos a matriz a ser diagonalizada a partir da relação de recorrência obtida no apêndice C (eq. 96), assumindo o termo de *hopping* como $J = J_{n'} = 1$, a

⁸Funções de Wannier são funções ortogonais para diferentes sítios em um cristal, o que as tornam convenientes para serem usadas como base para a expansão de estados eletrônicos[75].

⁹É fácil intuir a partir dessa discussão que o espaço de Hilbert de um sistema composto por N_e partículas interagentes tem dimensão N^{N_e} , resultando em um problema nada trivial.

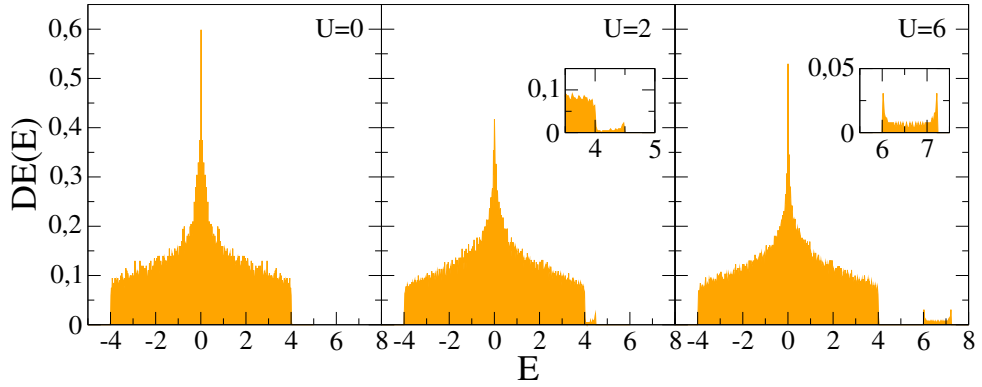
energia *on-site* como $\epsilon_i = 0$ e $N = 100$ íons.

A densidade de estados normalizada (DE) é dada pela soma dos estados l em cada nível de energia E como expõe a equação 27:

$$DE(E) = \frac{1}{N^2} \sum_{l=1}^{N^2} \delta(E_l - E) \quad (27)$$

e seu gráfico é revelado na figura 15, considerando vários valores de interação entre os elétrons.

Figura 15: Densidade de estados para rede cristalina de 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U .



Fonte: Autora, 2020.

Observamos a singularidade de van Hove no centro da banda. Além disso, vemos o surgimento da sub-banda de estados ligados para energias de interação maiores que zero, exatamente como descrito na literatura[77]. Para valores pequenos da interação ($U = 2$), existe uma superposição da sub-banda de estados ligados com a de estados não-ligados, dificultando sua detecção. A medida que a interação entre os elétrons se torna mais forte ela se afasta da sub-banda principal até que, para $U = 6$, ela se torna totalmente separada.

O trabalho de Claro, Weisz e Curilef apresentou limites obtidos analiticamente para a banda de estados ligados $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ e propôs que para $U > 4J$ as duas bandas são separadas[66]¹⁰. Esses limites estão calculados no apêndice C (vide tabela 1). Calculando para o caso de $U = 6$, temos os limites da sub-banda: $6 \leq E \leq 7,21$ e, assim, ambos os resultados são vistos no gráfico.

Para analisarmos melhor essa nova banda de estados ligados calculamos a distância,

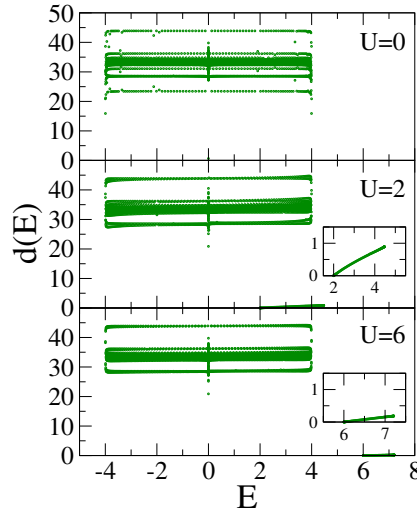
¹⁰Claro e seus colaboradores também mostraram a equivalência entre o sistema de N elétrons interagentes percorrendo uma cadeia unidimensional com o de um elétron se movendo em uma rede N -dimensional com uma superfície de defeitos dividindo o espaço em domínios simétricos.

que nos dá um parâmetro da correlação entre os elétrons, a partir da expressão

$$d(E) = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} |n_{\uparrow} - n_{\downarrow}| |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}|^2 \quad (28)$$

para uma cadeia de 100 sítios e diferentes valores de interação elétron-elétron. No gráfico da figura 16, podemos observar que a distância média quando os elétrons não interagem ($U = 0$), isto é, para estados não ligados, é aproximadamente $d \approx 35$. No entanto, quando existe a interação no sistema, $U > 0$, vemos que a distância referente à sub-banda de estados ligados, restrita aos limites já discutidos ($U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$), é muito pequena. Com o aumento da interação, podemos notar que a distância diminui ainda mais. Quando $U = 6$, temos que $d \approx 0$.

Figura 16: Densidade de estados para rede cristalina de 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U .



Fonte: Autora, 2020.

Este comportamento nos mostra que os estados ligados possuem uma forte correlação, proposta inicialmente por Shepelyansky, que está associada ao movimento coerente dos elétrons. Por outro lado, devemos ter em mente que a interação tem origem no modelo de Hubbard com caráter repulsivo.

Com o intuito de uma análise mais detalhada desses aspectos, sabendo que a função de onda eletrônica deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (29)$$

resolvemos a seguinte relação de recorrência (eq. 97, obtida no apêndice C) para o caso

de elétrons distinguíveis espacialmente na representação de Wannier,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) = J_{n_\uparrow} \varphi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + J_{(n-1)_\uparrow} \varphi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + J_{n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}(t) \quad (30)$$

$$+ J_{(n-1)_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}(t) + (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t).$$

Resolvemos a equação de Schrödinger numericamente utilizando a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal $\Gamma(\Delta t)$ – que tem atuação $\Gamma(\Delta t) |\psi(t=0)\rangle = |\psi(\Delta t)\rangle$ – em FORTRAN, considerando $\hbar = 1$ e sendo l_0 a ordem da expansão:

$$\Gamma(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{l_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!} \quad (31)$$

A fim de analisarmos o caráter dual dos estados ligados que depende da distância inicial entre os elétrons ($2d_0$) em que é preparado o sistema, calculamos a amplitude de probabilidade $|\varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}|^2$ no plano formado pelas posições dos elétrons $n_\uparrow \times n_\downarrow$ para um tempo longo.

Para isso, utilizamos como condição inicial os pacotes gaussianos dados pela equação que se segue (eq. 32), considerando a posição inicial dos elétrons como $n_\uparrow^0 = N/2 + d_0$ e $n_\downarrow^0 = N/2 - d_0$:

$$\psi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t=0) = \frac{1}{A(\sigma)} \exp\left\{-\frac{(n_\uparrow - n_\uparrow^0)^2}{4\sigma^2}\right\} \exp\left\{-\frac{(n_\downarrow - n_\downarrow^0)^2}{4\sigma^2}\right\} \quad (32)$$

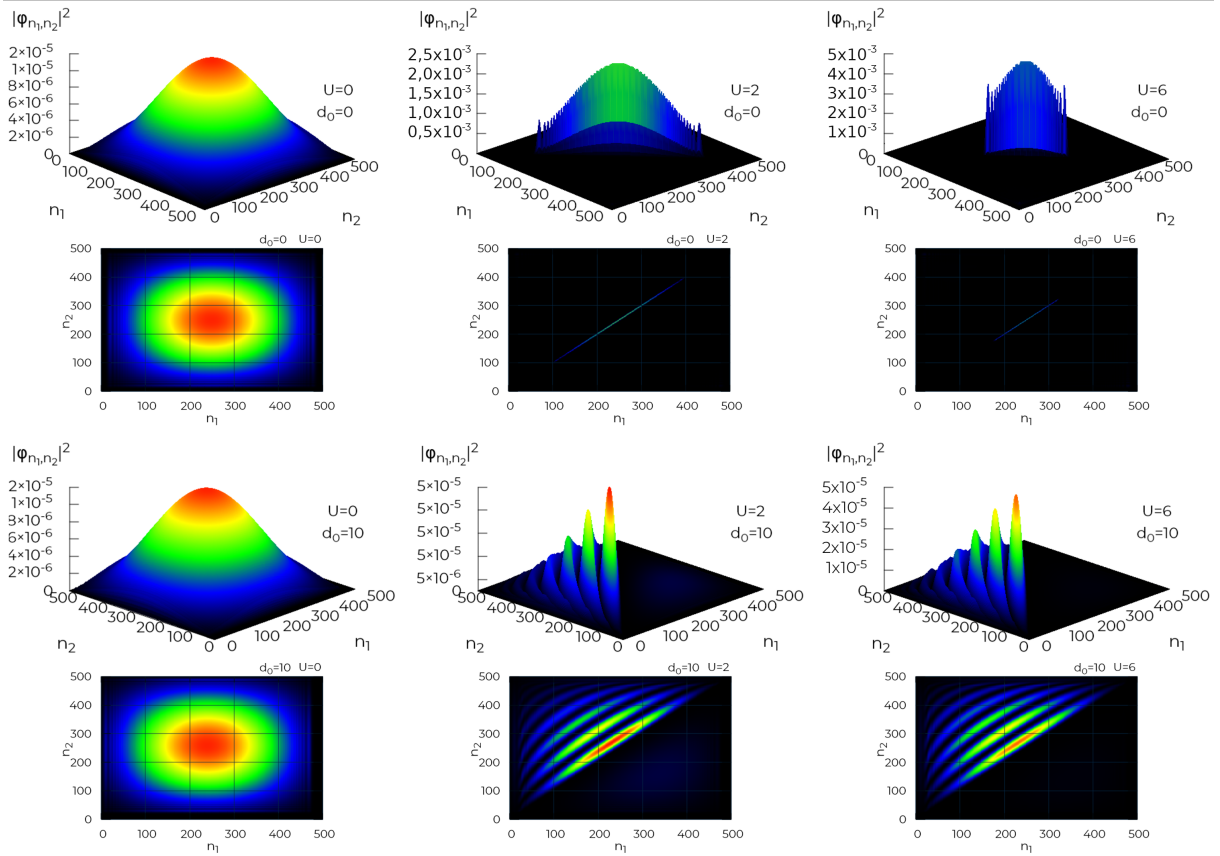
Comparamos na figura 17 a amplitude da função de onda eletrônica para sistemas preparados em diferentes distâncias iniciais $d_0 = 0$ e $d_0 = 10$. A amplitude desenhada foi para um tempo longo ($t = 117, 2$), para uma cadeia de $N = 500$ e diferentes valores de interação $U = 0, 2$ e 6 . Consideramos a ordem da expansão (eq. 31) $l_0 = 20$ e a discretização do tempo $\Delta t = 2^{-9}$.

As duas primeiras linhas de gráficos são para a distância inicial $d_0 = 0$, com os gráficos da coluna se diferenciando no valor da interação entre os elétrons U . A primeira linha são as amplitudes da função de onda no plano das posições dos elétrons $n_\uparrow \times n_\downarrow$, que no gráfico estão respectivamente representados por n_1 e n_2 , e a segunda linha são seus gráficos de contorno correspondentes. Nas duas últimas linhas temos a mesma organização, mas para a distância inicial $d_0 = 10$.

A partir do gráfico podemos notar que quando não há interação entre os elétrons, $U = 0$, os elétrons se movem independentemente e se espalham por toda a rede, tanto

para $d_0 = 0$ quanto para $d_0 = 10$.

Figura 17: Amplitude de probabilidade de dois elétrons percorrendo cadeia de 500 sítios preparados inicialmente a diferentes distâncias do centro $d_0 = 0$ e 10 e seu gráfico de contorno para $U = 0, 2$ e 6, $t = 117, 2$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2020.

Porém, ao adicionar a interação, surgem comportamentos distintos para cada condição inicial. Quando os elétrons estão inicialmente no mesmo sítio, eles se propagam apenas na diagonal, isto é, nas posições da rede em que $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$. Em outras palavras, eles se movem juntos, o chamado movimento coerente.

No entanto, quando os elétrons são inicialmente postos à uma distância $d_0 = 10$, eles ficam praticamente restritos a se moverem nos lados da cadeia onde foram inicialmente postos por conta do caráter repulsivo entre eles. Isso fica mais evidente ao observamos que o aumento da interação inibe ainda mais o acesso dos pacotes de onda para o outro lado da cadeia ($U = 6$).

Portanto constatamos, conforme discutido no gráfico 16, que a interação para elétrons preparados no mesmo sítio ($d_0 = 0$) promove o movimento coerente: a am-

plitude da função de onda eletrônica fica confinada à diagonal, isto é, às posições em que $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$.

Por outro lado, quando os sítios iniciais são diferentes, $d_0 = 10$, os estados ligados atuam no sistema de modo a repelir os elétrons, fazendo com que eles fiquem restritos aos lados da cadeia em que foram inicialmente postos. Em outras palavras, eles não passam um pelo outro para alcançar o outro lado da rede, uma vez que o custo energético de dupla ocupação é desfavorável.

Para melhor analisarmos como se dá a propagação da onda na cadeia, calculamos a extensão espacial da função de onda, que nos dá a ideia do raio do pacote de onda no plano formado pelo plano $n_{\uparrow} \times n_{\downarrow}$:

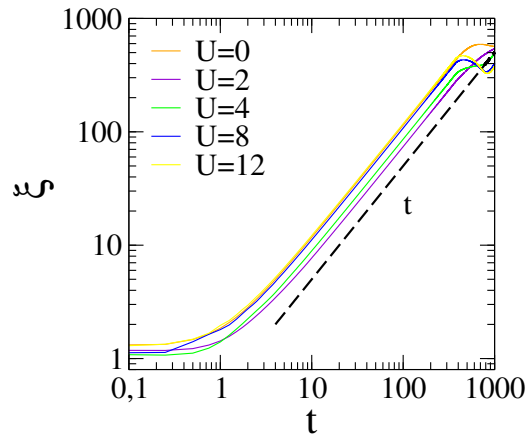
$$\xi(t) = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \sqrt{(n_{\uparrow} - \langle n_{\uparrow}(t) \rangle)^2 + (n_{\downarrow} - \langle n_{\downarrow}(t) \rangle)^2} |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}(t)|^2, \quad (33)$$

sendo o centróide a posição média da função de onda

$$\langle n_s(t) \rangle = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} (n_s) |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}(t)|^2 \quad (34)$$

Utilizamos como condição inicial os pacotes gaussianos (eq. 32) de largura $\sigma = 1$ como condição inicial da função de onda dos elétrons dispostos no centro da cadeia $n_s^0 = N/2$, ou seja, $d_0 = 0$.

Figura 18: Extensão espacial de cadeia cristalina de 1500 íons percorrida por dois elétrons com diferentes interações U , com $\Delta t = 2^{-2}$ e $l_0 = 18$.



Fonte: Autora, 2020.

Os cálculos para montar a figura 18 envolveram diferentes valores de interação

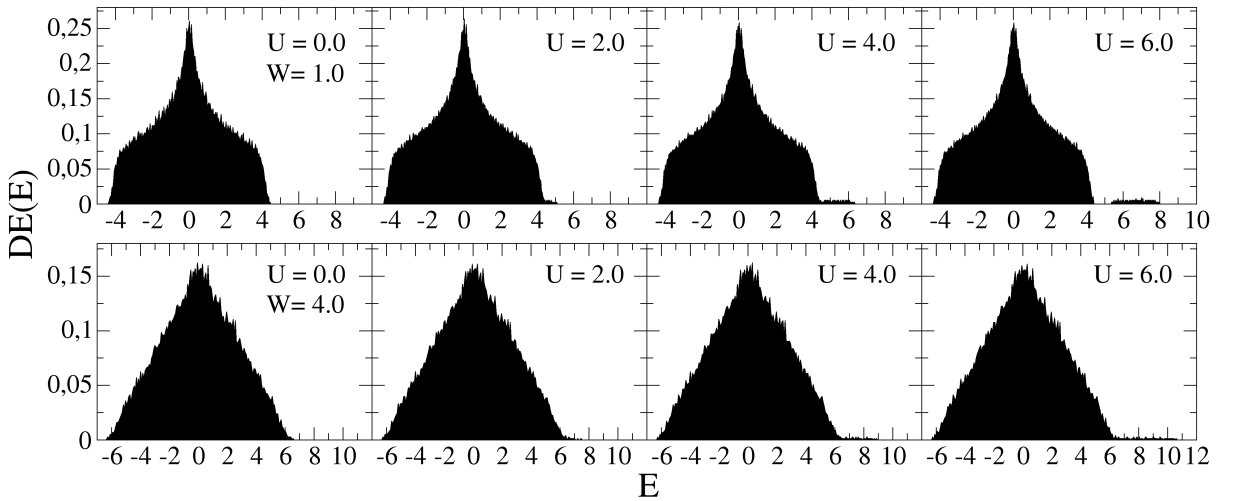
U em uma cadeia de $N = 1500$ íons, ordem da expansão $l_0 = 18$ e $\Delta t = 2^{-2}$. Podemos observar na figura que a extensão aumenta linearmente com o tempo para todos os valores de interação entre os elétrons, nos mostrando um comportamento balístico do pacote de onda de dois elétrons, exatamente como na literatura[34], novamente validando nosso código computacional.

3.2 Interação Elétron-Elétron em Redes Desordenadas

3.2.1 Desordem Composicional

Investigamos, então, a influência da desordem composicional no modelo de elétrons que interagem repulsivamente. Como vimos na seção 2.2, a desordem composicional fisicamente representa um material constituído por íons diferentes (vide fig. 8) –, e implementamos isso computacionalmente atribuindo à energia de acoplamento no íon ϵ_n do hamiltoniano da eq. 25 um valor aleatório dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$.

Figura 19: Densidade de estados para redes com 100 sítios desordenados composicionalmente percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U e duas larguras de desordem ($W = 1$ e $W = 4$) utilizando 10 amostras.



Fonte: Autora, 2018.

A média da densidade de estados (eq. 13) de 10 amostras obtida para uma cadeia de 100 átomos está na figura 19. A primeira linha de gráficos é para largura de desordem $W = 1$ e a segunda, para $W = 4$.

Analisando o caso desordenado em relação ao caso cristalino (figura 15) para dois elétrons, podemos notar os mesmos comportamentos observados quando comparamos os

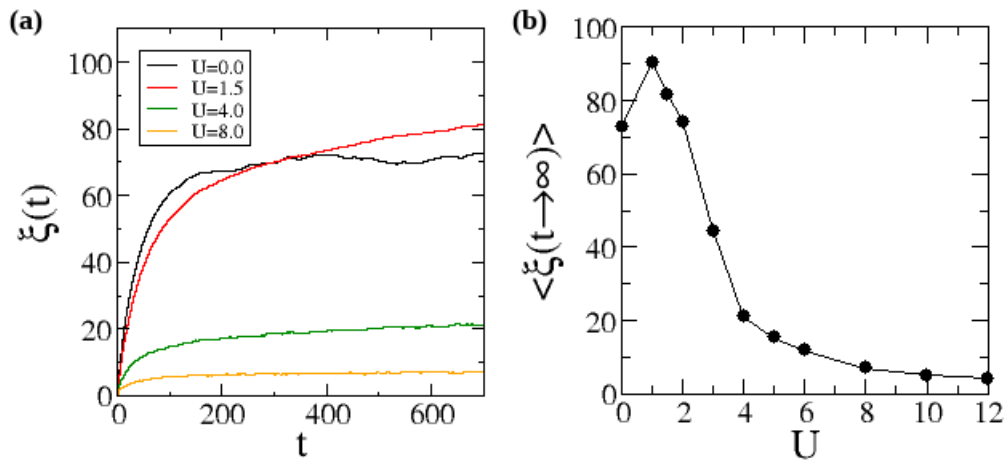
casos de um elétron cristalino (fig. 7) e desordenado (fig. 12), que indicam presença de estados localizados.

Vemos que a estrutura da densidade de estados do sistema desordenado apresenta rugosidade; que a singularidade de van Hove é suavizada; e que ocorre um alargamento em suas bandas – tanto na de estados não ligados quanto na de estados ligados. Notamos também que quanto maior a largura da desordem, maior é o aumento da largura das bandas e mais rugoso é o aspecto da DE .

Assim como na figura de dois elétrons em cadeia cristalina (fig. 15), surge a sub-banda de estados ligados. Da mesma forma que ocorria com o gráfico citado, a sub-banda de energia para valores de interação pequenos está superposta à de estados ligados, até conseguir se separar. Assim, conforme a interação aumenta, a nova sub-banda se afasta da sub-banda de estados não ligados. Percebemos no gráfico que, para uma maior largura na desordem ($W = 4$), a sub-banda de estados ligados precisa de um valor maior de interação elétron-elétron para se afastar. O que está de acordo com a previsão analítica para a largura das bandas.

A fim de averiguar mais detalhadamente o papel da interação no sistema de dois elétrons desordenados, reproduzimos o artigo de W. Dias e M. Lyra que mostra, como já mencionamos anteriormente, uma dependência não monotônica da localização em função da interação[21].

Figura 20: (a) Extensão espacial de 18 amostras de 500 íons com desordem composicional percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U , com $\Delta t = 0,01$ e $W = 1$; (b) Média da extensão para $t \rightarrow \infty$ em função da interação.



Fonte: Autora, 2017.

Calculamos, na figura 20, a extensão espacial resolvendo a equação de Schrödinger (eq. 30) a partir do método de Runge-Kutta de 4^a ordem com autoexpansão da cadeia na linguagem FORTRAN. Consideramos 18 amostras de 500 íons com largura de desordem $W = 1$ e precisão $\Delta t = 0,01$. Além de considerar a evolução temporal (figura a), apresentamos também o valor da extensão espacial média para um tempo longo de evolução temporal para diversos valores de interação (ver figura b), isto é, para quando $t \rightarrow \infty$.

Diferentemente do caso cristalino, em que a extensão espacial escala com o tempo (figura 18), no caso de desordem composicional, fig. 20(a), as partículas estão localizadas, uma vez que a extensão dos pacotes de onda não apresenta grande amplitude, saturando após um pequeno intervalo de tempo.

Além disso, verificamos que a interação entre as partículas influencia a extensão dos pacotes, de maneira que uma interação intermediária é capaz de reduzir o grau de localização ao comparar com o caso sem interação. Mas, para fortes valores de interação, observamos um efeito contrário, onde o grau de localização é aumentado por influência da interação.

O gráfico da figura 20(b) apresenta de modo mais claro esse comportamento não monotônico da localização de Anderson: há um enfraquecimento na localização para valores baixos de interação ($0 \leq U \leq 1$), mas, para interações maiores ($U > 1,5$), temos o comportamento contrário. Uma vez que obtivemos comportamento semelhante ao da literatura[21], validamos nosso código computacional.

Os resultados apresentados, já conhecidos na literatura, mostram o quão relevante é o papel da interação na dinâmica dos elétrons em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade. Dentro desse contexto, investigamos um sistema de dois elétrons interagentes em uma cadeia com desordem estrutural. Ausente na literatura, esses estudos, que apresentaremos a seguir, revelam que o enfraquecimento da localização mantém uma estrutura similar ao caso de desordem composicional, cujo comportamento não monotônico tem sido revelado.

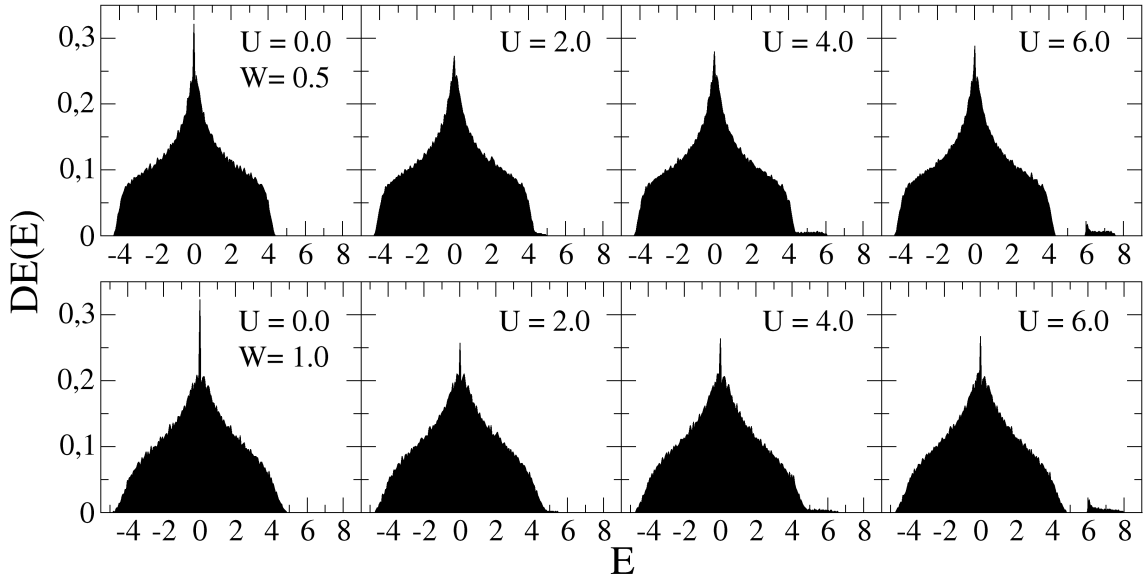
3.2.2 Desordem Estrutural

Dando início ao nosso tema específico – publicado recentemente[27] – investigamos o problema com desordem estrutural, isto é, resolvemos o hamiltoniano de Anderson-Hubbard equação 25

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s \epsilon_n c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + \sum_{n=1}^N \sum_s J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] \\ + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow}$$

assumindo o termo de *hopping* dado por $J_{n'_s} = 1 + \Delta J_{n'_s}$, sendo $\Delta J_{n'_s}$ um valor aleatório que varia dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$, onde W é a largura da desordem. Essa escolha se deve ao fato de tomarmos as constantes do termo cinético como sendo 1, ou seja, consideramos $-\hbar^2/2m = 1$. Como queremos estudar o efeito da desordem apenas no termo cinético, consideraremos os íons iguais, logo, $\epsilon_n = 0$.

Figura 21: Densidade de estados para redes com 100 sítios com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U , larguras de desordem $W = 0.5$ e $W = 1.0$ e utilizando 10 amostras.



Fonte: Autora, 2018.

Primeiramente, analisamos o caso estático resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12) utilizando a relação de recorrência obtida no apêndice C, eq. 96, e calculando a densidade de estados (eq. 13). Tomamos $W = 0.5$ e $W = 1.0$, 100 sítios e 10 amostras para a figura 21.

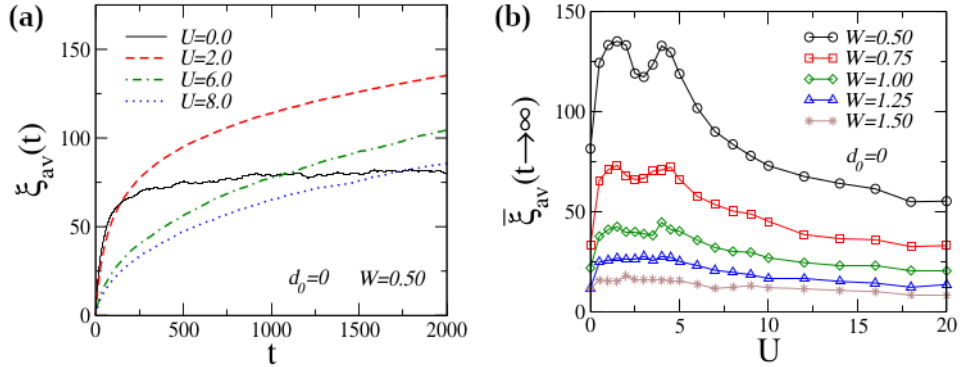
Nessa figura, podemos notar a rugosidade na estrutura da densidade de estados, que se intensifica com o aumento da largura da desordem, exatamente como no caso de

desordem composicional (fig. 19). Também podemos ver o aumento da largura das bandas em comparação com o caso sem desordem (fig. 15), que é maior quanto maior W . Estas características – rugosidade e alargamento das bandas – estão relacionadas à presença de desordem e são observadas nos casos de um e de dois elétrons para os dois tipos de desordem.

Os gráficos, como esperado, apresentam o surgimento da sub-banda de estados ligados, que para valores de interação coulombiana pequenos ($U < 4$), apresenta superposição com a banda de estados não ligados. Conforme aumentamos o valor de interação, vemos que a sub-banda criada se separa da banda principal, estando completamente afastada para $U = 6$.

Investigaremos a seguir o enfraquecimento da localização de Anderson devido à interação calculando a relação de recorrência da equação de Schrödinger dependente do tempo dada pela expressão 30. Para isso, utilizamos a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal (eq. 31) até a 20ª ordem com autoexpansão da cadeia na linguagem de programação C para obter a extensão espacial (eq. 33).

Figura 22: (a) Extensão espacial de 2500 íons com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U , $\Delta t = 0.06$ e $W = 0.5$; (b) Média da extensão para $t \rightarrow \infty$ em função da interação para diferentes larguras de desordem W .



Fonte: W.S. Dias e autora, 2020.

As funções de onda iniciais dos elétrons estão completamente concentradas no centro de uma cadeia de 2500 sítios, isto é, são do tipo delta e estão inicialmente localizadas no sítio $n_0 = 1250$ e evoluem no tempo com um passo $\Delta t = 0.06$. No gráfico da figura 22(a), consideramos a largura da desordem $W = 0.5$ e observamos a extensão espacial média de 40 amostras em função do tempo para diferentes valores de interação entre os elétrons. Já na figura 22(b), temos a extensão média após um longo tempo de evolução

temporal (quando $t \rightarrow \infty$) para larguras de desordem W diferentes, conforme indicado na legenda.

Semelhantemente ao caso de desordem composicional, verificamos que a interação entre as partículas influencia a extensão dos pacotes: quando a interação é fraca, a localização enfraquece; mas, conforme a interação fica mais forte, o pacote torna-se mais localizado.

Esse comportamento é melhor observado na figura 22(b), onde vemos que na faixa de $0 \leq U < 2$, para as diferentes larguras de desordem W , a localização do pacote enfraquece; enquanto que para valores maiores, $U > 4$, há uma mudança de comportamento, mais evidenciado para menores larguras de desordem. Isso resulta em um conjunto de valores ótimos para promover o enfraquecimento da localização que são mais evidentes em pequenos graus de desordem ($W = 0.50$ e 0.75).

A localização é enfraquecida para valores pequenos/intermediários de interação por causa do movimento coerente promovido pelos estados ligados, que são predominantes no sistema uma vez que os pacotes de onda dos elétrons foram dispostos inicialmente no mesmo sítio. No entanto, para interações intermediárias/fortes os estados ligados possuem energias muito maiores do que as da banda principal (fig. 13) e isso faz com que o pacote de onda eletrônico tenha dificuldade em acessar todos os estados do sistema ao se propagar, provocando um aumento da localização.

Observamos, assim, que o caráter não monotônico da localização em função da interação também acontece para a desordem estrutural, sugerindo que é um fenômeno global para a desordem, pois está presente para os dois tipos de desordem.

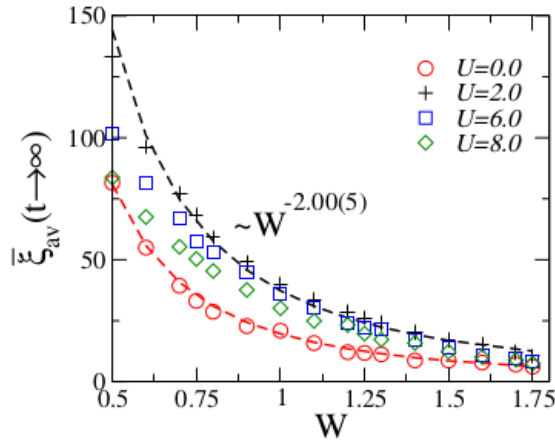
O caso com desordem estrutural, quando comparado ao com desordem composicional (fig. 20), apresenta uma diferença que é a existência de um aumento em $U = 3,5$ alcançando um máximo em $U = 4$, a partir de onde volta a diminuir. A existência desse novo máximo em $U = 4$ é explicada pela probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos que no caso com desordem estrutural possui um grande valor para essa magnitude de interação, sendo maior do que com desordem composicional.

Fizemos também o gráfico da extensão espacial média para tempo longo em função da largura da desordem W para diferentes valores de interação elétron-elétron na figura 23. Podemos observar que a extensão espacial, que oferece uma relação com o comprimento de localização, é inversamente proporcional à largura da desordem, concordando com a

literatura que apresentou a seguinte relação B^2/W^2 , sendo B a largura da banda de Bloch[17]¹¹.

A curva para $U = 2$ comparado com o regime sem interação ($U = 0$) corrobora os resultados anteriores sobre o enfraquecimento da localização de Anderson induzida pela interação entre partículas. Esse efeito se torna menos pronunciado conforme a largura da desordem aumenta e se torna comparável à largura da banda principal. Para interações mais fortes, observamos que as curvas tendem a descer para a curva de $U = 0$.

Figura 23: Média da extensão espacial em tempos longos para de 2500 íons com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U em função da largura de desordem .



Fonte: W.S. Dias e autora, 2020.

Para estudar melhor a influência dos estados ligados e não-ligados na dinâmica do sistema de dois elétrons, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12). Apresentamos a distância média, calculada na eq. 28, que nos dá informação sobre a correlação entre os elétrons, e a função participação (eq. 35)

$$P(E) = \frac{1}{\sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}|^4} \quad (35)$$

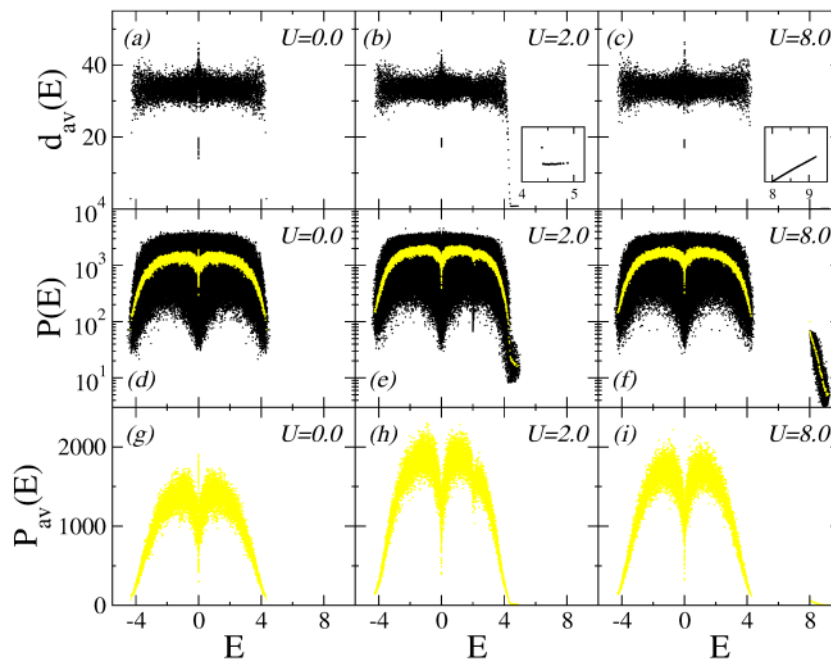
que nos dá uma estimativa do número de estados sobre os quais o autovetor da energia E_l está espalhado. Calculamos a média de 40 amostras para um sistema de $N = 100$ sítios e largura de desordem $W = 0.50$.

A distância média *versus* a energia nos revela que, para pequenos valores de in-

¹¹A largura da banda de Bloch é referente aos estados não-ligados (largura da banda para um elétron), portanto a largura da banda para o modelo de dois elétrons é o quadrado da largura da banda de Bloch.

teração entre os elétrons (quando os estados ligados estão superpostos aos não-ligados), a distância dos dois tipos de estados se assemelham, ou seja, os estados ligados tendem a se comportar como não-ligados. No entanto, ao aumentar a interação e as sub-bandas começarem a se desacoplar, os estados que não estão superpostos apresentam uma diminuição na distância entre os elétrons. No regime de forte interação (quando as sub-bandas já estão completamente desacopladas), a distância entre os elétrons nos estados ligados é bem pequena.

Figura 24: (a-c) Distância média para 40 configurações de desordem, (d-f) logaritmo da participação (pontos pretos) e da participação média (pontos amarelos) (g-i) participação média para uma cadeia de 100 íons com desordem estrutural percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U em função da energia.



Fonte: W.S. Dias e autora, 2020.

No gráfico da participação, como esperado, vemos que os estados perto do centro da banda ($E_0 = 0$) mostram um número maior do que os dos extremos. Existe claramente uma preponderância de estados não-ligados cuja participação é proporcional ao quadrado do comprimento da localização típico¹². Corroborando resultados prévios, observamos que a interação entre as partículas está promovendo um fortalecimento da localização no regime de interações intermediárias. Além disso, vemos que a participação média aumenta

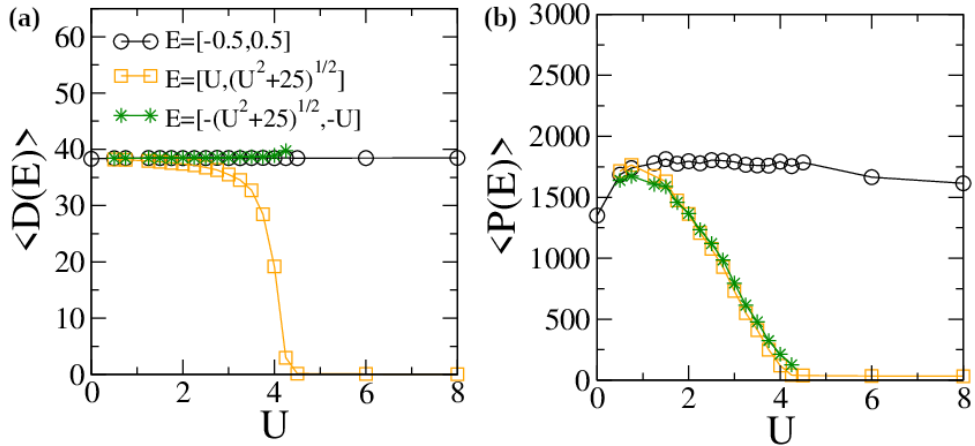
¹²A participação é proporcional ao espaço de Hilbert do sistema de um elétron (que é proporcional ao comprimento de localização típico). Assim, como o espaço de Hilbert para dois elétrons é o quadrado do espaço de Hilbert para um elétron, temos que a participação é proporcional ao quadrado do comprimento da localização típico.

com a presença de interação ($U = 0$), mas que para interação forte ($U = 8$) esse aumento é suavizado.

Os gráficos na fig. 25(a) e (b) nos mostram as médias das distância e participação médias para os intervalos de energia referentes às bandas ligadas e não ligadas já discutidas e calculadas no apêndice E. Para o cálculo dos limites utilizamos o valor $J = 1.25$, que é o maior valor possível para J_n quando a largura da desordem é $W = 0.50$.

O intervalo de energia calculado na média para a curva de bolas pretas é o centro da banda principal $[-0.5, 0.5]$, que possui estados não-ligados para $U > 0.5$; para a curva de quadrados laranjas, foi utilizado o intervalo referente à sub-banda de estados ligados, que possui superposição dos estados ligados e não-ligados até $U \approx 5$, quando as bandas se desacoplam inteiramente; e o oposto desse último intervalo, para que tenhamos o comparativo do mesmo intervalo de energia, porém contendo apenas os estados não-ligados.

Figura 25: (a) Média das distância média e (b) participação média para os valores de energia correspondentes às sub-bandas de estados ligados, não ligados e ao oposto dos ligados para uma cadeia de 100 íons com desordem composicional percorrida por dois elétrons com largura de desordem $W = 0.50$ em função da interação entre os elétrons U .



Fonte: Autora, 2019.

Podemos observar que a média da distância entre elétrons para o centro da banda se mantém praticamente constante e para as energias opostas, de estados não ligados, também, como esperado uma vez que o centro da banda praticamente não possui estados ligados. Por outro lado, para as energias dentro do limite de estados ligados (quadrados laranjas), temos que inicialmente, quando as sub-bandas estão superpostas e esse intervalo de energia possui estados ligados e não ligados, observamos que a distância é

praticamente igual à distância dos outros intervalos de energias. Isso mostra que para valores pequenos de interação, até a sub-banda de estados ligados estar próxima de se separar completamente da banda principal ($U = 4$), o comportamento dominante é o comportamento de elétrons não-ligados, conforme vimos anteriormente. Por outro lado, quando as sub-bandas se separam, vemos que a distância referente aos estados ligados diminui abruptamente, indicando a ligação entre os elétrons.

A participação aumenta com a presença da interação, conforme discutimos antes. Mas, ao contrário do gráfico da distância na fig. 25(a) em que as curvas para os intervalos de energias compostos de estados não-ligados são semelhantes, a participação média apresenta um comportamento bem diferente para os intervalos que contêm estados não-ligados correspondentes à curva de bolas pretas e de estrelas verdes.

Enquanto que a participação média para as energias no centro da banda se mantém quase constante, a participação para os outros intervalos de energia diminui com mais suavidade do que o observado na distância com o aumento da interação. Na participação observamos que a curva de quadrados laranjas – que para valores de $U > 5$ possui apenas os estados ligados – diminui com o aumento da interação de forma bem semelhante à curva de estrelas verdes – que possui apenas estados não-ligados. Assim, os estados ligados do sistema correlacionam os elétrons, mas não interferem muito no número de estados sobre os quais a função de onda está espalhada. A presença de interação apenas aumenta a participação para interações pequenas e depois, diminui.

Em outras palavras, apesar de detectarmos uma correlação entre os elétrons da sub-banda de estados ligados a partir da distância entre os elétrons, a participação da função de onda dos dois elétrons não se altera. Portanto, a participação não é uma boa medida para trazer informação sobre a influência dos estados ligados na propagação de dois elétrons na rede.

4 INTERAÇÃO E OSCILAÇÕES DE BLOCH

Fenômenos interessantes surgem a partir da coexistência de dois elétrons interagentes sob ação de campo elétrico e vêm sendo estudados e observados tanto teoricamente quanto experimentalmente[28, 29, 30, 31, 32, 33].

Usando uma extensão da teoria da dinâmica de campo-médio, o efeito em um campo elétrico forte em elétrons interagentes foi estudado. Mostraram numericamente que as oscilações de Bloch decaem por causa da correlação entre os elétrons[78].

Usando análise numérica e dinâmica, Claro e colaboradores mostraram que a interação entre elétrons induz uma oscilação adicional do autoestado da velocidade de deriva quando o *hopping* é pequeno, sendo o período dessa oscilação determinado somente pelo alcance e magnitude da interação[66].

As propriedades espectrais do hamiltoniano de Bose-Hubbard sob ação de campo estático mostraram que para valores intermediários de campo ocorre um rápido decaimento das oscilações de Bloch do momento atômico médio. Também mostraram que a escala temporal desse decaimento fornece uma medida direta para o decaimento da coerência entre as partículas[79].

De maneira geral, podemos dizer que a interação elétron-elétron em sistemas de muitos corpos atua destrutivamente sobre as oscilações de Bloch[34]. Entretanto, para sistemas de baixa densidade eletrônica em uma cadeia sujeita a um campo elétrico externo, foi demonstrado o comportamento oposto. O trabalho de W. Dias e colaboradores previu teoricamente que o centróide do pacote de onda pode apresentar um comportamento oscilatório com frequência predominante do dobro da frequência das oscilações de Bloch, ou seja, $\omega = 2F$ [28]. Esse dobramento foi posteriormente confirmado experimentalmente utilizando átomos bosônicos interagentes ultrafrios[33].

Motivados por esses resultados que contrapõem a fenomenologia já estabelecida nas pesquisas desse ramo da matéria condensada, investigaremos as oscilações de Bloch sob influência de um elemento a mais no sistema: a interação coulombiana não-local, que surge ao assumirmos que a blindagem no potencial eletrônico é amortecida ao termos os elétrons em sítios vizinhos.

Neste capítulo detalharemos o que são as oscilações de Bloch a partir de uma análise semi-clássica resgatando o problema de elétrons independentes em uma rede de Bloch – periódica e cristalina – unidimensional.

Em seguida, reproduziremos resultados conhecidos na literatura a fim de analisar as fenomenologias que surgem a partir dos elementos que são objeto de nosso estudo (interação e campo de e interação não-local) e de validar nosso código computacional.

Resgataremos o dobramento da frequência causado pela interação elétron-elétron local na presença de campo elétrico. Depois, observaremos a influência da interação não-local em um sistema de baixa densidade cristalino sem campo elétrico aplicado. Por fim, apresentaremos os nossos resultados sobre a influência da interação não-local no sistema de baixa densidade sob a influência de campo elétrico externo constante.

4.1 Oscilações de Bloch

A função de onda eletrônica é também influenciada pela ação de campo elétrico. É conhecido na literatura que elétrons não interagentes na presença de um campo externo apresentam um comportamento oscilatório conhecido por oscilações de Bloch[2, 80, 81, 82, 83, 84, 85]. O campo elétrico faz com que a função de onda fique localizada em uma fração da rede e que esse pacote eletrônico se mova periodicamente, efeito denominado localização dinâmica.

Esses movimentos periódicos do centróide do pacote de onda localizado são as chamadas oscilações de Bloch. Possuem frequência igual à magnitude do campo aplicado ($\omega = F$) e amplitudes diretamente e inversamente proporcionais à largura da banda dos estados e ao campo elétrico, respectivamente. Esses resultados a princípio foram mostrados para redes cristalinas, mas também foram comprovados para cadeias com desordem correlacionada de longo alcance[86].

As oscilações eletrônicas de Bloch foram observadas pela primeira vez em super redes semicondutoras[87, 88, 89]. Um fenômeno similar também foi obtido em redes bidimensionais de guias de onda e super redes óticas baseadas em silicone poroso que apresentaram oscilações sustentadas do campo eletromagnético, chamadas oscilações fotônicas de Bloch[90]. A influência do campo elétrico em sistemas de baixa dimensionalidade tem sido explorada em diferentes sistemas como transistores de filmes finos[91, 92], estudos sobre fotocondutividade[93] e o efeito Edelstein[94, 95].

Abaixo mostraremos um argumento semi-clássico para induzir o comportamento oscilatório do pacote de onda e suas características começando com o caso mais simples: elétrons não interagentes se movendo sob ação de nenhuma força a não ser a do meio

crystalino. Nesse contexto, temos que

$$H = E_l(\vec{k}) \quad (36)$$

e a equação de Hamilton $\dot{\vec{p}} = -\partial H/\partial \vec{r}$ ao quantizarmos o momento, isto é, tomando $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ se torna

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial E_l}{\partial \vec{r}} \quad (37)$$

$$\therefore \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{\partial E_l}{\partial \vec{r}} = 0 \quad (38)$$

o que nos diz que o vetor de onda \vec{k} é uma constante. No entanto, se acrescentamos o potencial $V(\vec{r})$, temos

$$H = E_l(\vec{k}) + V(\vec{r}) \quad (39)$$

logo

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} [E_l(\vec{k}) + V(\vec{r})] \quad (40)$$

$$\therefore \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}} \quad (41)$$

Se $V(\vec{r})$ é a energia potencial de um elétron sob influência de um campo eletrostático, a expressão pode ser reescrita em termos do campo elétrico constante \vec{F}

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{F} \quad (42)$$

uma vez que a força elétrica é conservativa, isto é, $-\vec{\nabla}V = -e\vec{F}$. Integrando a equação acima, concluímos que o vetor de onda varia linearmente com o tempo

$$\int d\vec{k} = -\frac{1}{\hbar} \int e\vec{F} dt \quad (43)$$

$$\therefore \vec{k} = \vec{k}_0 - \frac{e\vec{F}t}{\hbar}$$

Assim, vemos que o vetor de onda depende linearmente com o tempo. Vamos analisar agora a dependência da energia em função do vetor de onda. Por simplicidade, faremos a análise para um sistema unidimensional.

Como já discutimos na seção 2.1.3, a energia de elétrons livres depende quadraticamente do vetor de onda, ou melhor, $E = p^2/2m$. No entanto, a energia de elétrons em uma rede periódica é bem diferente – periódica e limitada tanto superior quanto inferiormente.

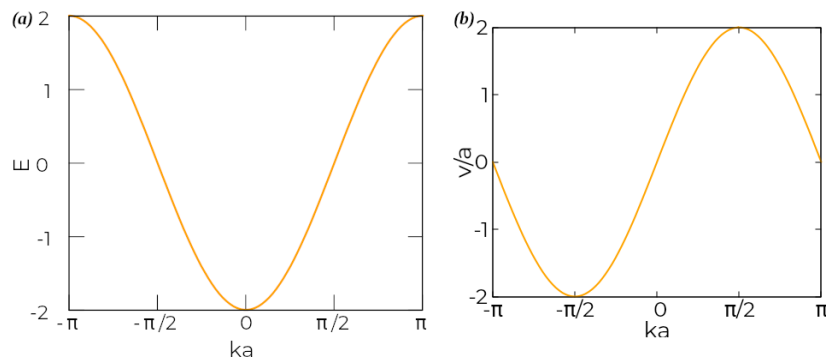
No apêndice B calculamos que a energia dos elétrons de Bloch é periódica em k e obedece a relação $E(k) = \epsilon - 2J \cos(ka)$ (eq. 88). Por outro lado, a partir da equação de Hamilton $\dot{\vec{r}} = \partial H / \partial \vec{p}$, temos que

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left[E_l(\vec{k}) + V(\vec{r}) \right] \quad (44)$$

$$\therefore \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_l}{\partial \vec{k}} \quad (45)$$

o que nos dá, para os elétrons de Bloch, $v(k) = 2aJ \sin(ka)/\hbar$. Note que essa expressão é a mesma independentemente de termos um potencial $V(\vec{r})$ no sistema ou não. O gráfico para representar a energia e a velocidade dos elétrons de Bloch tomando $\hbar = 1 = J$ e $\epsilon = 0$ é mostrado na figura 26.

Figura 26: (a) Energia e (b) velocidade para elétrons de Bloch em função do vetor de onda k .



Fonte: Autora, 2020.

Observamos que a primeira zona de Brillouin está entre $[-\pi a, \pi a]$, portanto o vetor da rede recíproca é $\vec{K} = 2\pi/a\hat{k}$. As funções são periódicas, isto é, $E(k + 2\pi/a) = E(k)$ e $v(k + 2\pi/a) = v(k)$. Como o vetor de onda varia linearmente com o tempo, a energia e a

velocidade mantêm o aspecto periódico de suas curvas em função do tempo.

$$\begin{aligned} E(t) &= \epsilon - 2J \cos \left(ak_0 - \frac{eaF}{\hbar} t \right) \\ v(t) &= \frac{2aJ}{\hbar} \sin \left(ak_0 - \frac{eaF}{\hbar} t \right) \end{aligned} \quad (46)$$

Dessa forma, o elétron atravessa o espaço recíproco linearmente com o aumento do tempo até chegar em $k = 2\pi/a$, onde sua energia e sua velocidade se repetem, são as mesmas do ponto $k = 0$. Com o aumento do tempo a velocidade varia o sentido do movimento do elétron periodicamente, pois ela ora é negativa e ora é positiva. Essa mudança na velocidade faz o centróide do elétron oscilar: se pensarmos na posição do elétron como a integral da velocidade, é fácil perceber que a posição do elétron será regida por uma função sinusoidal

$$\begin{aligned} x(t) &= \int v(t) \\ &= x_0 + \frac{2aJ}{\hbar} \cos \left(ak_0 - \frac{eaF}{\hbar} t \right) \frac{\hbar}{eaF} \\ \therefore x(t) &= x_0 + \frac{2J}{eF} \cos \left(ak_0 - \frac{eaF}{\hbar} t \right) \end{aligned} \quad (47)$$

cuja frequência¹³,

$$\omega = -\frac{eaF}{\hbar}, \quad (48)$$

é proporcional à magnitude do campo elétrico contínuo e à carga da partícula $q = -e$. Além disso, da expressão 47 podemos ver que a amplitude das oscilações é dada por $2J/eF$, mas sabemos que $2J$ é a largura da banda de energia dos elétrons de Bloch. Portanto, a amplitude é diretamente proporcional à largura da banda e inversamente proporcional ao

¹³Outra forma de calcular a frequência: ao assumirmos $k(t=0) = k_0 = -\pi/a$, podemos falar que o período, isto é, o tempo para o elétron sair de k_0 e chegar em $k = \pi/a$, é dado por

$$\begin{aligned} k(T) = k_0 - \frac{eF}{\hbar} T &\Rightarrow \frac{\pi}{a} = -\frac{\pi}{a} - \frac{eF}{\hbar} T \\ \therefore T &= -\frac{2\pi}{a} \frac{\hbar}{eF} \end{aligned}$$

e, uma vez que a frequência é $\omega = 2\pi/T$, temos que $\omega = -eaF/\hbar$.

campo externo¹⁴.

Esses resultados obtidos a partir de uma análise semi-clássica, apesar de terem sido observados experimentalmente[96, 97, 98, 99], descrevem um sistema muito simplificado que não leva em consideração elementos como impurezas da rede, vibrações térmicas e interação entre elétrons. Em materiais reais, além da interação dos elétrons com fônons, com outros elétrons e com as imperfeições, os elétrons também sofrem um grande número de colisões, o que suprime o fenômeno oscilatório.

Na próxima seção abandonaremos a aproximação do elétron livre acrescentando a interação entre elétrons. Para isto, utilizaremos o modelo de duas partículas interagentes e reproduziremos resultados já conhecidos na literatura a fim de mostrar os efeitos da interação entre elétrons na oscilação de Bloch.

4.2 Interação Elétron-Elétron e Campo Elétrico

O modelo de dois elétrons interagentes em rede unidimensional cristalina sob ação de um campo elétrico, estático e uniforme F é descrito pelo hamiltoniano de Hubbard:

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF a \mathbf{n}_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \\
 + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right]
 \end{aligned} \tag{49}$$

sendo ϵ a energia de acoplamento do elétron de *spin* s ao sítio n ; e a carga do elétron; F o campo elétrico; a o espaçamento da rede; \mathbf{n} o operador posição; U a interação de natureza coulombiana entre elétrons que ocupam o mesmo sítio n ; e J o termo de *hopping*, isto é, do elétron de *spin* s se mover do sítio n aos vizinhos $n - 1$ e $n + 1$.

Claro e colaboradores mostraram a equivalência entre o sistema de dois elétrons interagentes percorrendo uma cadeia unidimensional sob ação de campo elétrico constante com o de um elétron movendo-se em uma rede bidimensional com uma superfície de

¹⁴Também observamos esse resultado ao integarmos a velocidade obtida em 45:

$$\begin{aligned}
 \vec{r}(t) - \vec{r}(0) &= \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_l(\vec{k})}{\partial \vec{k}} dt' = \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_l(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \frac{dt'}{d\vec{k}} d\vec{k} \\
 &= -\frac{1}{eF} \left[E_l(\vec{k}(t)) - E_l(\vec{k}(0)) \right].
 \end{aligned}$$

defeitos dividindo o espaço em domínios simétricos na diagonal $n_\uparrow = n_\downarrow$ e o campo aplicado é paralelo a essa linha[66].

A fim de observar a localização dinâmica induzida por um campo elétrico DC externo aplicado paralelamente à cadeia unidimensional, vamos considerar como condição de contorno a cadeia aberta. No entanto, a condição de contorno tem pouca influência nos resultados numéricos porque o pacote de onda fica preso em uma região muito pequena da cadeia, como veremos a seguir.

Aplicamos o hamiltoniano da equação 49 na função de onda que deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo. Expandimos a função de onda na representação de Wannier (eq. 26) e chegamos na seguinte relação de recorrência, obtida no apêndice G:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) = J_{n_\uparrow} \varphi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + J_{(n-1)_\uparrow} \varphi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + J_{n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}(t) \\ + J_{(n-1)_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}(t) + [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eaF(n_\uparrow + n_\downarrow) + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}] \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t)$$

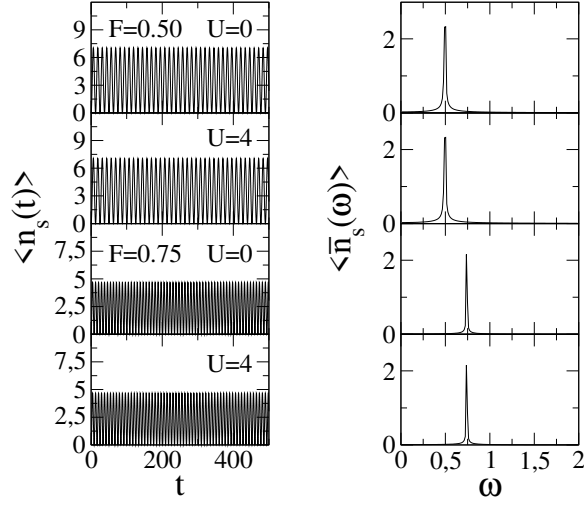
Com a finalidade de descrever o comportamento do pacote de onda em função do tempo, expandimos em série de Taylor o operador evolução temporal $\Gamma(\Delta t)$ com ordem $l_0 = 20$ e passo temporal $\Delta t = 2^{-9}$ (eq. 31). Utilizando como condição inicial um pacote de onda gaussiano de largura $\sigma = 1$, posto inicialmente no centro com os elétrons distando $2d_0$ um do outro, i.e., $n_\uparrow^0 = N/2 - d_0$ e $n_\downarrow^0 = N/2 + d_0$.

Caracterizamos o centróide $\langle n_s(t) \rangle$ do elétron de *spin* s em função do tempo t (calculado através da equação 34) e sua transformada de Fourier, que nos retorna o centróide no domínio da frequência angular ω , $\langle \bar{n}_s(\omega) \rangle$,

$$\langle \bar{n}_s(\omega) \rangle = \mathcal{F}\{\langle n_s(t) \rangle\} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle n_s(t) \rangle e^{-i\omega t} dt \quad (50)$$

calculada computacionalmente através do método Transformada de Fourier Rápida (FFT). Para um sistema de $N = 120$ íons iguais e igualmente espaçados de modo que tomamos $\epsilon = 0$ e $J = 1$, em unidades de $e = \hbar = a = 1$, com os elétrons preparados a uma distância de $2d_0 = 20$ um do outro. A figura 27 é obtida para dois valores de campo elétrico $F = 0.50$ que são as duas primeiras linhas de gráficos e $F = 0.75$, que são as duas últimas.

Figura 27: Centróide e sua transformada de Fourier de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 10$ e diferentes interações U e submetidos a campo elétrico constante $F = 0.5$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.

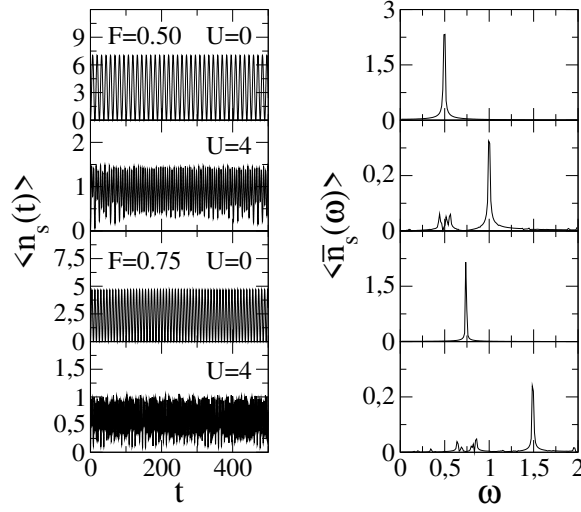


Fonte: Autora, 2019.

Podemos observar que para elétrons que começam muito afastados um do outro, isto é, $d_0 \gg \sigma$, a frequência angular do pacote eletrônico se mantém $\omega = F$ – mesmo quando $U = 4$ – para os dois valores de campo elétrico. Isso mostra que a interação elétron-elétron não tem influência nas oscilações de Bloch quando os elétrons estão inicialmente afastados, pois os pacotes de onda de cada elétron permanecem presos em torno de sua posição inicial pelo campo elétrico e obedecem à frequência característica $\omega = eFa/\hbar$ dada pelo tratamento semiclássico[86].

Abaixo fizemos a mesma análise, mas com elétrons inicialmente dispostos no mesmo sítio. Assim, com $N = 120$ sítios e $d_0 = 0$, obtivemos o centróide $\langle n_s(t) \rangle$ e sua transformada de Fourier $\langle \bar{n}_s(\omega) \rangle$ para elétrons com interação *on-site* $U = 0$ e 4 sob ação de um campo elétrico $F = 0.50$ nos dois primeiros conjuntos de gráficos e $F = 0.75$, nos dois últimos.

Figura 28: Centróide e sua transformada de Fourier de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.5$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2019.

Podemos observar que a ausência de interação, $U = 0$, proporciona um movimento oscilatório do centróide com frequência proporcional ao campo elétrico aplicado, ($\omega = F$). Tal comportamento é corroborado pela análise semi-clássica apresentada na seção 4.1 (ver eq. 48). Ao colocarmos a interação $U=4$, nós observamos a largura de oscilação do centroide diminuindo e a frequência predominante de oscilação sendo proporcional ao dobro da frequência de oscilação para elétrons não interagentes ($\omega = 2F$). Esse resultado revela uma nova perspectiva, uma vez que os resultados obtidos para sistemas de muitos corpos prevê a interação destruindo as oscilações de Bloch[78, 79, 34].

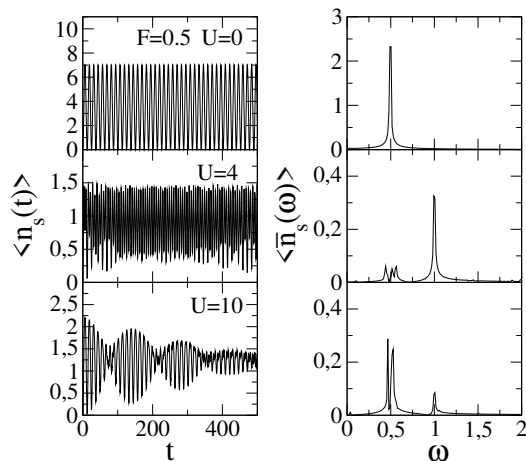
Além disso, a presença de interação faz com que a amplitude de oscilações diminua. Essas duas características são observadas também para $F = 0.75$, indicando uma generalidade nessas duas características na presença de interação. As amplitudes de oscilação para o campo maior ($F = 0.75$) são menores, obedecendo a relação de proporcionalidade inversa discutida no começo do capítulo, aferida da equação 47.

Para valores pequenos de interação U foi discutido na seção 3.1 que as bandas de estados ligados e não ligados se sobrepõe, até que atingem um valor intermediário de interação, $U \approx 4$, quando os estados ligados estão na iminência de se separar completamente da banda de estados não ligados. Nesse cenário, de $U \approx 4$, a probabilidade de dupla ocupação atinge seu máximo decaindo em seguida, quando os estados ligados estão completamente separados e se afastando da banda principal.

No ponto de máxima probabilidade de dupla ocupação, $U \approx 4$, os elétrons têm a coerência de *hopping* máxima e a componente da função de onda correspondente aos estados ligados terá uma evolução dinâmica típica de uma partícula única composta por um par de elétrons. Desse modo, o potencial elétrico efetivo local que será sentido por essa "partícula" composta será $2eFan$, explicando assim o dobramento da frequência observado, observado mais facilmente para interações intermediárias em que a probabilidade de dupla ocupação é alta.

A fim de analisarmos o comportamento para interações mais fortes, desenhamos na figura 29 os gráficos do centróide em função do tempo e de sua transformada de Fourier em função da frequência agora para elétrons que estão inicialmente no mesmo sítio, $d_0 = 0$, e sob ação de campo elétrico $F = 0.50$.

Figura 29: Centróide e sua transformada de Fourier de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e submetidos a campo elétrico constante $F = 0.5$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2019.

Podemos observar que para valores de interação elétron-elétron fortes ($U = 10$), a frequência $\omega = F$ é re-amplificada. O dobramento da frequência, $\omega = 2F$, e a diminuição da amplitude das oscilações são explicados pelos estados ligados provenientes da interação entre os elétrons que promovem um comportamento não-monotônico da probabilidade de dupla ocupação em função do potencial da interação U : para $U = 0$ ela é pequena, pois os elétrons se estendem por toda a cadeia, como vimos na figura 32; para valores intermediários de interação $3 \leq U \leq 6$ ela é alta, pois a interação promove o movimento coerente dos elétrons que estão no mesmo sítio; e para valores fortes de interação $U > 7$,

ela diminui.

O que ocorre é que a interação favorece o *hopping* coerente associado aos estados ligados, mas seu caráter repulsivo aumenta a largura do pacote de onda, o que faz com que a probabilidade da dupla ocupação diminua. Assim, para valores maiores de interação, o caráter repulsivo da interação prevalece e a frequência de Bloch $\omega = F$ é re-amplificada.

A modulação observada no padrão oscilatório está relacionado à pequena separação do pico em $\omega = F$. Essa separação é da ordem de J^2/U para U grande e surge devido à interação entre os elétrons que gera uma frequência de oscilação adicional da velocidade de deriva de estados ligados[66]. Além disso, os estados ligados fazem com que a amplitude de oscilações diminua quando ligada a interação.

Usando átomos bosônicos ultrafrios de rubídio interagentes que se movem em tubos desacoplados de uma rede ótica unidimensional, o movimento coerente das duas partículas foi experimentalmente observado, assim como o dobramento da frequência para valores de interação repulsiva intermediários[33].

4.3 Interação Elétron-Elétron Não-Local e Campo Elétrico

A interação coulombiana restrita à elétrons que estão localizados no mesmo sítio é uma idealização. O campo elétrico do elétron, como sabemos, diminui ao nos afastarmos dele. Com isso, mesmo com a blindagem eletrônica que ocorre quando os elétrons se acoplam a um íon, os potenciais de elétrons vizinhos perturbam essa blindagem, fazendo com que os elétrons interajam. Dessa forma, para elétrons vizinhos, a blindagem é amortecida e os elétrons interagem não-localmente.

Nesta seção estudaremos os efeitos desse novo elemento, interação não-local, na localização dinâmica. Para isso, iniciamos reproduzindo os resultados já existentes sobre as propriedades da interação não-local em sistemas unidimensionais de dois elétrons. Em seguida, apresentaremos os resultados para o nosso trabalho sobre a influência dessa interação em sistemas submetidos à campo elétrico constante.

4.3.1 Interação Elétron-Elétron Não-Local

Nesta seção vamos discutir o papel da interação entre elétrons vizinhos na dinâmica do sistema de dois elétrons ao reproduzir o trabalho de Peixoto e Dias[100]. Nesse trabalho eles mostraram que a interação não-local promove o surgimento de uma nova banda de

estados ligados e um aumento da propagação da função de onda eletrônica, como veremos mais adiante.

Quando um elétron se acopla a um íon, pode-se assumir que há uma reorganização da nuvem eletrônica que fará o potencial elétrico deste elétron acoplado sofrer uma blindagem. A interação não-local que apresentaremos nesta seção surge ao assumirmos que a blindagem no potencial eletrônico é perturbada ao termos dois elétrons em sítios vizinhos. Os elétrons ocupam o mesmo orbital de seus respectivos íons e passam a sentir a presença um do outro. Consideramos que a blindagem eletrônica é amortecida e, assim, elétrons vizinhos sentem uma interação de magnitude $V = U/3$.

O hamiltoniano que descreve este modelo é dado por

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \\
 & + V \sum_{n=1}^N \left[c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{(n+1)_\downarrow} + c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{(n-1)_\downarrow} \right]
 \end{aligned} \tag{51}$$

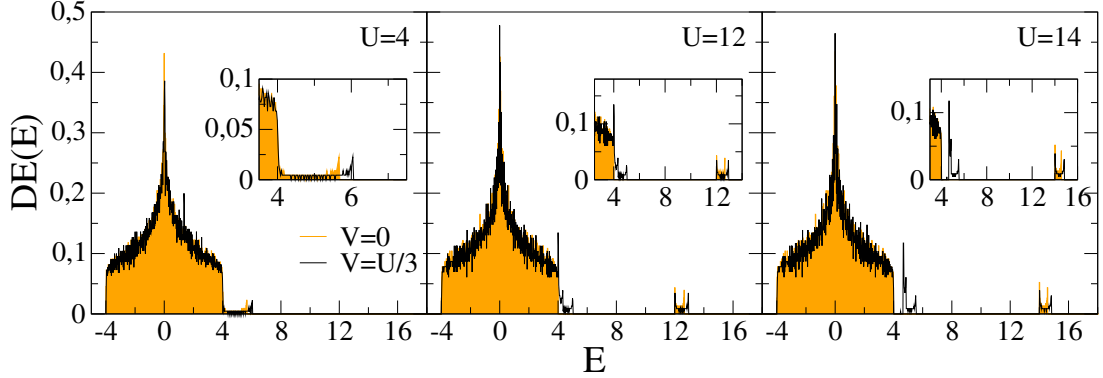
sendo ϵ a energia de ligação do elétron de *spin* s ao sítio n ; J o termo de *hopping*, isto é, do elétron de *spin* s se mover do sítio n aos vizinhos $n - 1$ e $n + 1$; e por fim U e V , respectivamente, as interações de natureza coulombiana entre os elétrons que ocupam o mesmo sítio n e que ocupam sítios vizinhos, isto é, $|n_\uparrow - n_\downarrow| = 1$.

Diagonalizamos o hamiltoniano preenchido de acordo com a equação 118 (obtida no apêndice E ao aplicar o hamiltoniano da eq. 51 à equação de Schrödinger independente do tempo 12) utilizando a sub-rotina **SSYEVD** da biblioteca **LAPACK** considerando um sistema de $N = 100$ sítios de íons iguais, tomando como referencia o valor de energia de ligação do elétron ao sítio $\epsilon = 0$, e igualmente espaçados com $J = 1$ para valores de interação coulombiana *on-site* $U = 4, 12$ e 14 .

Calculamos a densidade de estados normalizada (DE) dada pela soma da quantidade de estados em cada nível de energia E como expõe a equação 27 e fizemos os gráficos da figura 30 onde o preenchimento amarelo é referente ao caso de $V = 0$ (discutido na seção 3.1) e a linha roxa, ao caso de $V = U/3$.

Para $U = 4$, podemos observar que a presença de interação não-local causou um alargamento das bandas da densidade de estados. Não obstante, ao olhar as curvas para $U = 12$ e $U = 14$ vemos que esse alargamento ocorre na sub-banda de estados ligados uma

Figura 30: Densidade de estados para rede cristalina com 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U com e sem interação não-local V .



Fonte: Autora, 2020.

vez que ao estarem completamente separadas, a banda principal continua com a largura dada analiticamente na tabela 1 e apenas a sub-banda de estados ligados sofreu alteração. Além desse efeito, vemos em $U = 4$ um pico que sugere a criação de uma nova sub-banda. Para $U = 12$ vemos essa nova sub-banda se separando da banda principal e, em $U = 14$, finalmente separada.

Essa nova sub-banda é referente ao novo elemento que adicionamos no sistema, a interação entre elétrons vizinhos, e está relacionada à estados ligados. Nossos resultados estão de acordo com a literatura [100] e os limites analíticos das sub-bandas foram calculados no apêndice F e estão na tabela 2: $U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$ para estados ligados à interação *on-site* e $V \leq E \leq V + 4J^2/V$, à interação não-local.

Anteriormente falamos que a nova sub-banda que surgiu é referente a estados ligados. A fim de demonstrar isso, fizemos o gráfico da função correlação dada por

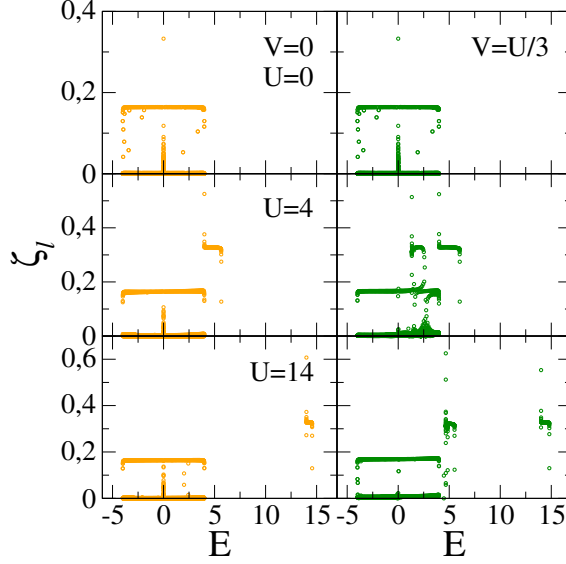
$$\zeta_l = \left| \frac{\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle_l - \langle n_\uparrow \rangle_l \langle n_\downarrow \rangle_l}{\langle n_\uparrow \rangle_l \langle n_\downarrow \rangle_l} \right| \quad (52)$$

onde $\langle n_s \rangle_l$ é o centróide do estado l , que está escrito na equação 34 e nos dá a média da posição mais provável $\langle n_s \rangle_l$ do elétron de *spin* s no estado l , e a média das posições simultâneas mais prováveis $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle_l$ para a dupla de elétrons no estado l . Note que se os elétrons têm pouca influência na determinação de suas posições, $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \approx \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle$, logo $\zeta = 0$.

Na figura 31 podemos perceber que alguns estados pertencentes ao intervalo de energia da nova sub-banda apresentam uma forte correlação elétron-elétron, mostrando

uma correlação maior do que a dos estados não ligados e, inclusive, muito semelhante à da sub-banda de estados ligados que já conhecíamos, referentes a U .

Figura 31: Correlação para rede cristalina com 100 sítios percorrida por dois elétrons com diferentes valores de interação U com e sem interação não-local V .



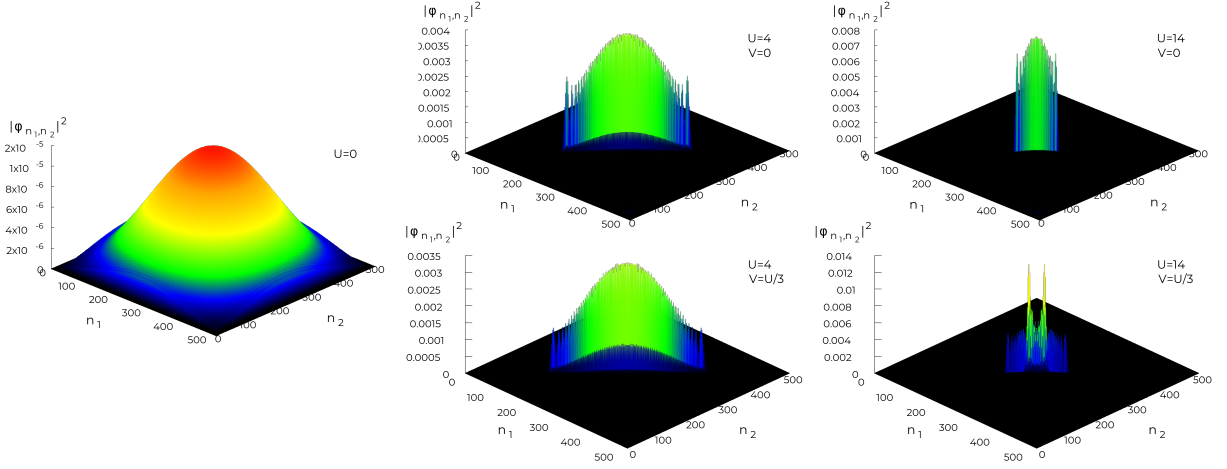
Fonte: Autora, 2020.

Para estudar a evolução temporal do pacote eletrônico, resolvemos a equação 119, que é obtida aplicando o hamiltoniano da equação 51 na Schrödinger dependente do tempo (vide apêndice E), a partir da expansão em série de Taylor do operador evolução temporal 31 utilizando a ordem de expansão $l_0 = 20$. Consideramos, inicialmente, o pacote de onda como uma gaussiana de largura $\sigma = 1$ centrada em $(N/2 - d_0, N/2 + d_0)$ descrito pela equação 32. Iniciamos com os elétrons no mesmo sítio, ou seja, $d_0 = 0$. Evoluímos o sistema com $N = 500$ sítios e fizemos o gráfico da amplitude de probabilidade do elétron para tempo longo no plano formado pelas posições dos elétrons.

Já discutimos anteriormente (seção 3.1) que para $U = 0 = V$ as duas partículas se movem independentemente e preenchem isotropicamente o plano das posições dos elétrons. Além disso, discutimos que presença de interação elétron-elétron *on-site*, $U > 0$, faz com que as partículas fiquem correlacionadas, o que é visto no gráfico com a amplitude de onda concentrada na diagonal $n_\uparrow = n_\downarrow$, isto é, quando os elétrons estão no mesmo sítio.

Os resultados da figura 32 sugerem que a interação não-local preserva essa característica, mas aumenta a propagação da onda eletrônica. Podemos associar isso ao fato de que a interação entre elétrons vizinhos promove um alargamento da sub-banda

Figura 32: Amplitude de probabilidade para $N = 500$ sítios em função das posições dos elétrons $n_{\uparrow} \times n_{\downarrow}$ para diferentes valores de interação U .



Fonte: Autora, 2020.

de interação *on-site*, bem como ao surgimento de uma nova sub-banda de estados ligados relacionada à interação não-local.

Além disso, é possível notar mudança no comportamento da função de onda para $U = 14$ e isso é devido ao fato de, na presença de interação elétron-elétron não-local, os elétrons ocuparem sítios vizinhos (primeiros e segundos vizinhos, ou seja, $|n_{\uparrow} - n_{\downarrow}| = 1, 2$) quando sujeitos a interações fortes $U > 10$, diferentemente de quando $V = 0$, em que essa ocupação é praticamente inexistente pois os elétrons tendem a ocupar apenas os mesmos sítios [100].

4.3.2 Interação Não-Local e Campo Elétrico

Nesta seção apresentaremos nossos resultados sobre a influência da interação não-local, discutida na seção anterior, nas oscilações de Bloch – inéditos na literatura. Resolvemos o modelo de dois elétrons com interação entre elétrons vizinhos em rede unidimensional cristalina sob ação de um campo elétrico, estático e uniforme F é descrito pelo

hamiltoniano de Hubbard estendido:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF a \mathbf{n}_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \\
& + V \sum_{n=1}^N \left[c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{(n+1)_\downarrow} + c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{(n-1)_\downarrow} \right] \\
& + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right]
\end{aligned} \tag{53}$$

sendo ϵ a energia de acoplamento do elétron de *spin* s ao sítio n ; e a carga do elétron; F o campo elétrico; a o espaçamento da rede; \mathbf{n} o operador posição; U a interação de natureza coulombiana entre elétrons que ocupam o mesmo sítio n ; J o termo de *hopping*, isto é, do elétron de *spin* s se mover do sítio n aos vizinhos $n - 1$ e $n + 1$; e V o termo de interação elétron-elétron para quando os elétrons ocupam sítios vizinhos.

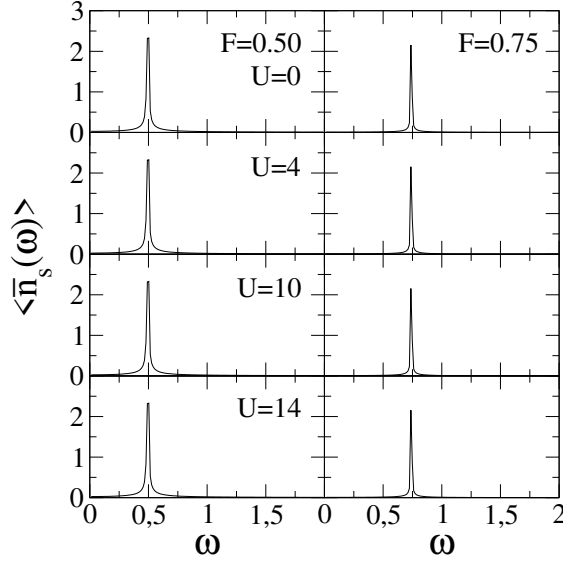
Semelhantemente à seção anterior, vamos considerar como condição de contorno a cadeia aberta. Aplicando o hamiltoniano da equação 53 na função de onda que deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo, expandimos a função de onda na representação de Wannier (eq. 26) e chegamos na seguinte relação de recorrência, calculada no apêndice H:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} = & J_{n_\uparrow} \varphi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + J_{(n-1)_\uparrow} \varphi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + J_{n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + J_{(n-1)_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} \\
& + [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow) + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}] \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \\
& + V \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} \right]
\end{aligned} \tag{54}$$

Para acompanhar a evolução temporal do pacote de onda eletrônico expandimos em série de Taylor o operador evolução temporal $\Gamma(\Delta t)$ com ordem $l_0 = 20$ e passo temporal $\Delta t = 2^{-9}$ (eq. 31). Utilizando como condição inicial um pacote de onda gaussiano de largura $\sigma = 1$, posto inicialmente no centro da rede, com os elétrons distando $2d_0$ um do outro, i.e., $n_\uparrow^0 = N/2 - d_0$ e $n_\downarrow^0 = N/2 + d_0$.

Caracterizamos o centróide $\langle n_s(t) \rangle$ do elétron de *spin* s em função do tempo t (calculado através da equação 34) e sua transformada de Fourier, que nos retorna o centróide no domínio da frequência angular ω , $\langle \bar{n}_s(\omega) \rangle$, calculada computacionalmente através do método Transformada de Fourier Rápida (FFT).

Figura 33: Transformada de Fourier do centróide de cadeia cristalina com 120 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 10$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.50$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.

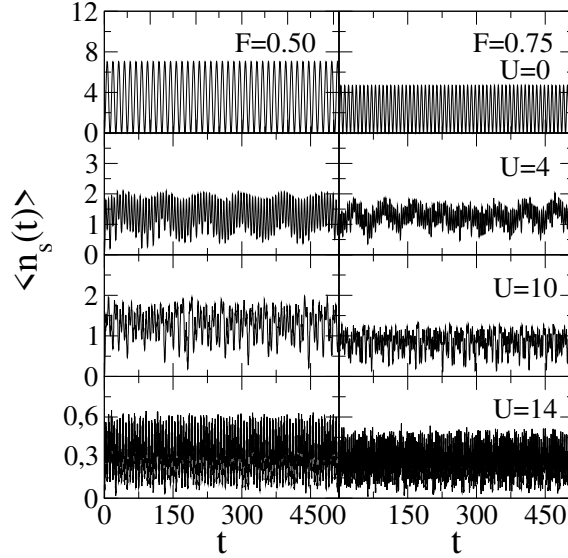


Fonte: Autora, 2020.

Assim como o que aconteceu na seção anterior, quando os elétrons são inicialmente colocados a uma distância maior do que a largura do pacote ($d_0 > \sigma$), os estados ligados não são favorecidos porque não existem sobreposição dos pacotes de onda eletrônicos dos elétrons. Com isso, o movimento coerente provindo dos estados ligados, oriundos da interação entre elétrons que ocupam tanto o mesmo sítio quanto sítios vizinhos, é vencido pelo movimento independente dos elétrons dos estados não ligados. Dessa forma, temos que a oscilação de Bloch é mantida para qualquer valor de interação, como vemos na figura 33.

Calculamos o centróide para $d_0 = 0$ e $N = 200$ na figura 34. Como esperado, ele apresenta uma diminuição na amplitude de oscilações por conta da influência dos estados ligados. No entanto, notamos que ela não diminui de $U = 4$ para $U = 10$, indicando que existe uma tendência dos estados não-ligados predominarem nessa região. Contudo, em $U = 14$ ela diminui muito, o que indica que nessa região os estados ligados voltam a ter maior influência sobre o sistema, o que não foi observado na seção anterior (sec. 4.2). Além disso, conforme esperado da relação encontrada no início do capítulo para a amplitude (eq. 47), vemos que o aumento do campo elétrico causa uma diminuição das amplitudes.

Figura 34: Centróide de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.50$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.

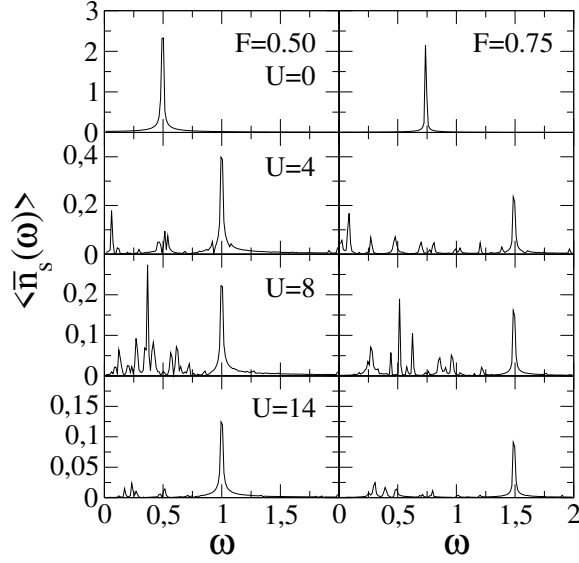


Fonte: Autora, 2020.

O centróide no espectro das frequências na figura 35 a seguir é obtido para dois valores de campo elétrico: $F = 0.50$ que está na primeira coluna do gráfico, e $F = 0.75$, na segunda. Nesta figura temos um sistema de $N = 200$ íons iguais e igualmente espaçados de modo que tomamos $\epsilon = 0$ e $J = 1$. Consideramos também $e = \hbar = a = 1$ e $V = U/3$, com os elétrons preparados inicialmente no mesmo sítio ($d_0 = 0$).

Vemos que, diferentemente do que aconteceu na figura 29 da seção anterior, para $V = 0$, o dobramento das oscilações de Bloch se mantém predominante mesmo para interações mais fortes. Além disso, observamos maior ruído no espectro das frequências. Os batimentos são causados pela competição de três tendências do sistema: frequência associada ao movimento coerente de elétrons que estão no mesmo sítio, ao movimento coerente de elétrons que estão em sítios vizinhos e o movimento independente dos elétrons.

Figura 35: Transformada de Fourier do centróide de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons com distância inicial $d_0 = 0$ e diferentes interações U e a campo elétrico constante $F = 0.50$ e 0.75 , com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2020.

Em um valor de interação intermediário-alto ($U = 8$), vemos que um pico próximo à frequência de Bloch (deslocado em $2/3$ da frequência de Bloch) supera a oscilação dobrada, apesar de não ser uma grande diferença. Esse comportamento nos faz intuir que a competição entre os estados ligados e não ligados apresente um comportamento não-monotônico que favorece os estados ligados para valores de interação intermediários iniciais, desfavorece depois para uma faixa de valores intermediários-altos e, por fim, favorece para valores altos.

Vale ressaltar que os picos de frequência em $U = 8$ estão associados ao movimento coerente (dobro da frequência de Bloch para um elétron), movimento independente (frequência de Bloch para um elétron) e efeitos de interferência, causados pela competição entre os três diferentes estados acima citados. Há também possíveis limitações associadas a aplicação da Transformada de Fourier, uma vez que o regime investigado pode não apresentar um caráter suficientemente estacionário.

Para melhor analisar essa competição entre os estados não ligados e ligados (correspondentes a elétrons vizinhos e a elétrons no mesmo sítio), calculamos a média da probabilidade de dupla ocupação

$$PDO(t) = \sum_{\substack{n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \\ n_{\uparrow} = n_{\downarrow}}} |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}(t)|^2, \quad (55)$$

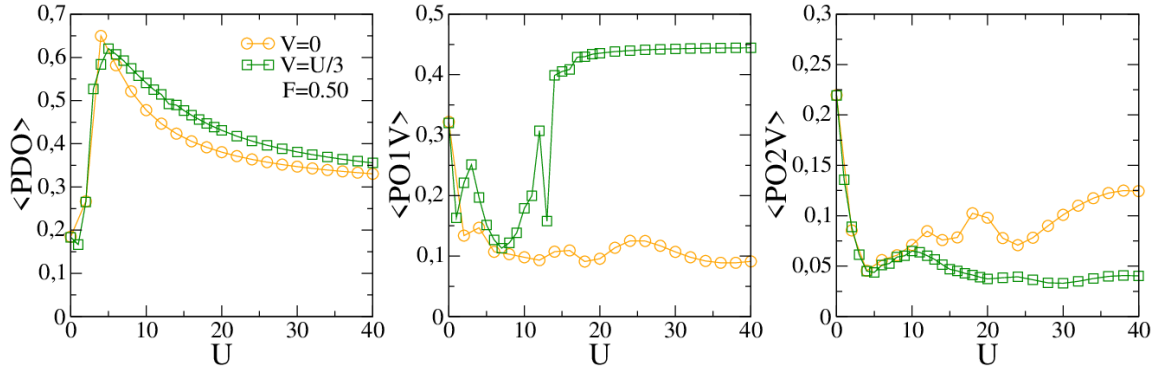
e da probabilidade de ocupação de primeiros e segundos vizinhos

$$PO1V(t) = \sum_{\substack{n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \\ n_{\uparrow} = n_{\downarrow} \pm 1}} |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}(t)|^2$$

$$PO2V(t) = \sum_{\substack{n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \\ n_{\uparrow} = n_{\downarrow} \pm 2}} |\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}(t)|^2 \quad (56)$$

para um tempo muito longo em função da interação entre os elétrons U na figura ???. A fim de comparar, colocamos a curva amarela para $V = 0$. Nos dois casos, temos $N = 200$ sítios e campo externo $F = 0.50$.

Figura 36: Média da probabilidade de dupla ocupação, ocupação de primeiros e segundos vizinhos para tempo longo de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons sem ($V = 0$) e com ($V = U/3$) interação não-local com distância inicial $d_0 = 0$ em função da interação U e a campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2020.

Vemos que, para valores iniciais de interação, a probabilidade de dupla ocupação aumenta, atingindo seu pico em valores intermediários, $U \approx 4$, e em seguida as chances dos elétrons ocuparem o mesmo sítio diminuem. Esse comportamento é bem semelhante tanto na presença quanto na ausência de interação não-local e, para o caso de $V = 0$, explica o porquê do dobramento da frequência para $U = 4$ e a re-amplificação das oscilações de Bloch para $U = 10$ vistos na seção anterior. As curvas são semelhantes, mas a curva verde (para $V = U/3$) é levemente maior do que a curva para $V = 0$, então a interação não-local promove aumento na probabilidade dos elétrons andarem juntos para interações

intermediárias-altas e altas ($U > 5$).

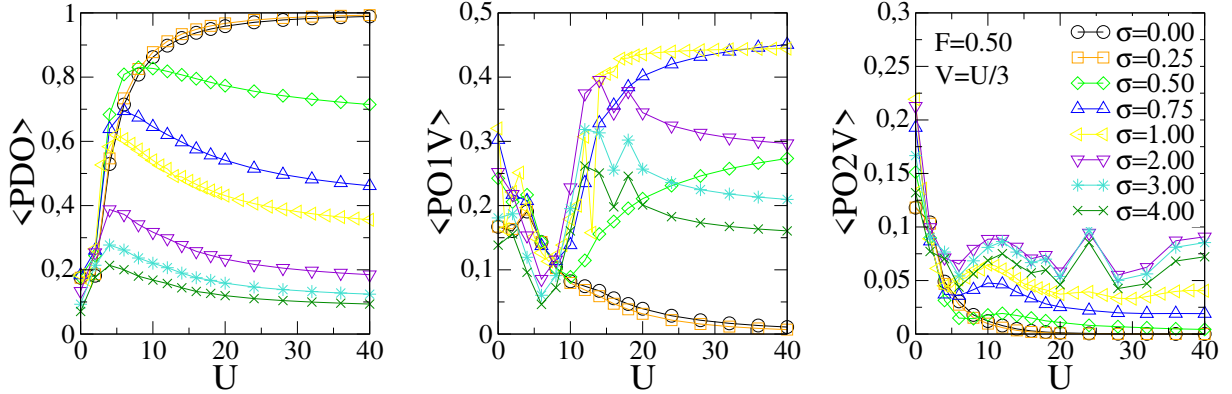
A probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos, no entanto, mostra uma grande diferença no comportamento das curvas. Na ausência de interação não-local, a probabilidade de estarem em sítios vizinhos diminui com o aumento da interação. No entanto, quando os elétrons interagem não-localmente o comportamento apresenta maior probabilidade de modo geral e, principalmente, em valores fortes de interação ($U \geq 10$).

Portanto o movimento coerente dos elétrons promovido pelos estados ligados relacionados à ocupação de primeiros vizinhos é responsável pela sustentação da predominância do dobramento da frequência de Bloch para valores altos de interação, vista no nosso gráfico em $U = 14$. Não obstante, a probabilidade de elétrons vizinhos diminui para interações intermediárias-altas ($5 < U < 10$) explicando o porquê de, para $U = 8$, a frequência de Bloch conseguir superar a frequência dobrada.

A probabilidade de ocupação de segundos vizinhos, por sua vez, não revela um comportamento muito diferente entre os sistemas até valores de interação fortes ($U > 10$). Nesse regime a interação não-local se mostra menos favorável à ocupação de segundos vizinhos pelos elétrons, o que é resultado do grande aumento na probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos.

Para analisarmos a influência da largura inicial dos pacotes eletrônicos na dinâmica do sistema fizemos a média das probabilidades de dupla ocupação e de ocupação de primeiros e segundos vizinhos para um tempo longo em função da interação para diferentes larguras σ na figura 37. Usamos uma cadeia de $N = 200$ sítios, com campo elétrico constante $F = 0.50$ e interação não-local $V = U/3$.

Figura 37: Média da probabilidade de dupla ocupação, de ocupação de primeiros e segundos vizinhos para tempo longo de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons para diferentes larguras de pacotes iniciais σ com distância inicial $d_0 = 0$ em função da interação U e a campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2020.

Para $\sigma = 0$ os dois elétrons estão inteiramente localizados no sítio central, pois $d_0 = 0$. Quando $U = 0$, os elétrons se movem independentemente apesar de ficarem presos em um segmento finito por causa do campo externo constante. Portanto, para um tempo longo a probabilidade de dupla ocupação se torna pequena.

Conforme a interação é ligada, o surgimento dos estados ligados correlaciona a dinâmica dos elétrons. Para interações fortes, o estado inicial é majoritariamente superposto à estados ligados e, portanto, a probabilidade de dupla ocupação é aproximadamente 1. Isso significa que os elétrons se comportam como uma única partícula executando *hopping* coerente. Observamos esse mesmo comportamento também para $\sigma = 0.25$, que é uma largura bem pequena.

Nos casos em que o pacote possui uma largura $\sigma \geq 0.5$, a $\langle PDO \rangle$ não mais tende a 1 para valores de interação fortes e observamos uma dependência não-monotônica da probabilidade de dupla ocupação em função da interação coulombiana. Isso se deve ao fato de que as contribuições da superposição do pacotes de onda com estados ligados e não-ligados possuem diferentes tendências: enquanto que a interação favorece o movimento coerente associado aos estados ligados, seu caráter repulsivo alarga o pacote de onda. Os pacotes eletrônicos do tipo delta possuem uma condição inicial que favorece a existência dos estados ligados.

Sabemos que a interação entre elétrons correspondente à $\langle PDO \rangle$ máxima representa também a situação física de máxima coerência entre os elétrons. Esse máximo, assim

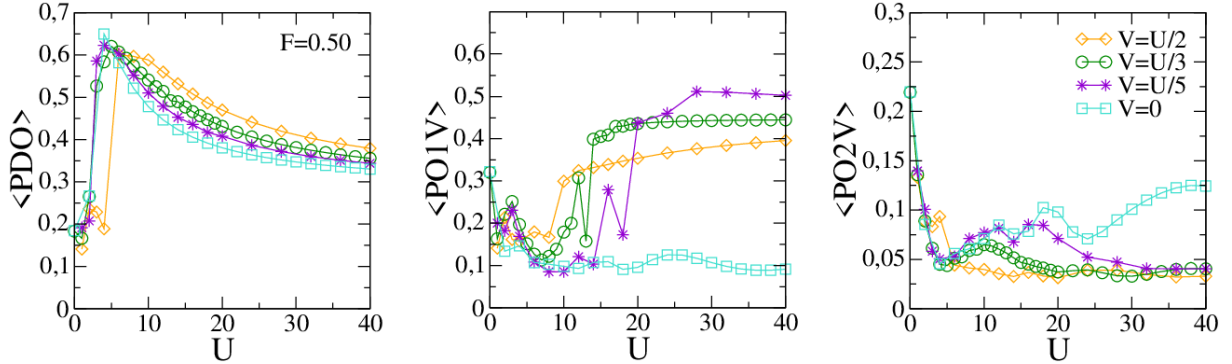
como a interação coulombiana característica, são funções decrescentes com a largura inicial do pacote. Como já explicado anteriormente, a componente do pacote eletrônico correspondente aos estados ligados vai ter uma evolução dinâmica típica de uma única partícula composta de um par de elétrons de modo que o potencial elétrico efetivo sentido por essa partícula composta será $2eFan$, explicando o dobramento da frequência. Esse efeito se torna mais pronunciado para valores de acoplamentos que produzem dupla ocupação máxima, que possui uma dependência com a largura do pacote inicial: quanto maior a largura do pacote eletrônico em $t = 0$, menor o valor de interação onde ocorre o dobramento da frequência.

A média da probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos para um tempo longo nos mostra, novamente, que as condições iniciais do pacote de largura $\sigma = 0.00$ e $\sigma = 0.25$ possuem um comportamento bem diferente de quando $\sigma \geq 0.50$. A $\langle \text{PO1V} \rangle$ é bem pequena e tende a zero para valores de interação altos. Por outro lado, quando temos uma largura inicial dos pacotes significativa, vemos que o aumento da largura leva ao aumento da probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos até chegar em $\sigma = 1$, que é a largura de máxima $\langle \text{PO1V} \rangle$. A partir dessa largura, a amplitude da $\langle \text{PO1V} \rangle$ se torna uma função decrescente com σ , mas maior do que para $\sigma \leq 0.25$.

Na probabilidade de ocupação de segundos vizinhos para um tempo longo observamos a mesma dependência não-monotônica da probabilidade em função da largura do pacote: para larguras $\sigma < 1$, a $\langle \text{PO2V} \rangle$ cresce. Aqui, no entanto, alcança o máximo para $\sigma = 2$, voltando a decrescer com o aumento de σ . Podemos notar, tanto no gráfico para $\langle \text{PO1V} \rangle$ quanto para $\langle \text{PO2V} \rangle$ que suas curvas para $\sigma = 2, 3$ e 4 possuem comportamentos semelhantes, enquanto que as curvas da $\langle \text{PO2V} \rangle$ para $\sigma = 0.5, 0.75$ e 1 possuem outra tendência.

Na figura 38 temos o comparativo para diferentes valores de interação não-local das médias das probabilidades de dupla ocupação e de ocupação de primeiros e segundos vizinhos para um tempo longo. Fizemos o gráfico para uma cadeia de $N = 200$ íons, distância inicial $d_0 = 0$, campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.

Figura 38: Média da probabilidade de dupla ocupação, de ocupação de primeiros e segundos vizinhos para tempo longo de cadeia cristalina com 200 íons percorrida por dois elétrons para diferentes valores de interação não-local com distância inicial $d_0 = 0$ em função da interação U e a campo elétrico constante $F = 0.50$, com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte: Autora, 2020.

Podemos observar que quanto maior o termo de interação não-local, maior a probabilidade de dupla ocupação média. Esse comportamento é explicado pelo fato da largura da sub-banda de estados ligados referente à dupla ocupação (à interação local), ser diretamente proporcional à V (vide tabela 2), isto é, aumentar a interação não-local aumenta a largura da banda de estados ligados que promovem a dupla ocupação.

Por outro lado, quanto menor o termo não-local (mas $V \neq 0$), maior sua probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos. Isso se deve ao fato de que, se lembrarmos da tabela 2, a largura da sub-banda de estados ligados referentes à interação entre vizinhos é inversamente proporcional à magnitude da interação V ($4J^2/V$), portanto quanto menor a interação não-local, mais larga é a sub-banda de estados ligados referentes à interação não-local, o que vai favorecer os estados de ocupação de primeiros vizinhos.

Nos dois casos anteriores, vimos que as probabilidades para o caso sem interação não-local é menor do que quando a interação entre vizinhos está presente. Isso se deve ao fato de que este último termo alarga a sub-banda de estados ligados referente à interação local e, além disso, cria uma sub-banda de estados ligados. No entanto, na média da probabilidade de ocupação de segundos vizinhos vemos o comportamento contrário. Apesar de não diferirem muito, a curva sem interação não-local é maior, principalmente para valores de interação maiores. Os estados ligados favorecem o movimento coerente dos elétrons: a interação *on-site* favorece a dupla ocupação eletrônica, enquanto a interação de primeiros vizinhos favorece ocupação predominantemente em sítios vizinhos. Graças à relevante contribuição oriunda dos estados ligados, observamos a $\langle PO2V \rangle$ do caso com

interação de primeiros vizinhos muito menor que o caso em que $V \neq 0$.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho investigamos sistemas de dois elétrons interagentes de *spins* opostos, distinguíveis espacialmente em cadeias unidimensionais. O grande interesse nesse modelo é estimulado pela possibilidade tanto de comportamento metálico em sistema bidimensional desordenado com forte correlação entre os elétrons, contrastando com a previsão da teoria de escala da localização, quanto de dobramento da frequência das oscilações de Bloch, contrastando com resultados de muitos corpos.

Utilizando as linguagens FORTRAN e C, aplicamos os métodos de diagonalização de matriz através da biblioteca BLAS (e LAPACK); de Runge-Kutta de 4ª ordem; de expansão em série de Taylor do operador evolução temporal; e de autoexpansão da cadeia para resolver a equação de Schrödinger independente e dependente do tempo utilizando as relações de recorrência obtidas nos apêndices.

A fim de caracterizar o sistema, calculamos a densidade de estados, a participação, a distância, a correlação, a extensão espacial, a amplitude da função de onda e a probabilidade de dupla ocupação e de ocupação de primeiros e segundos vizinhos.

Verificamos nossos códigos computacionais reproduzindo, inicialmente, resultados já existentes para o caso cristalino[34]. Assim como previsto na literatura, a densidade de estados mostra o surgimento da sub-banda de estados ligados e a extensão espacial, um comportamento balístico do pacote de onda tanto para o caso sem interação quanto para todos os valores de interação entre elétrons.

A fim de estudar a influência dos estados ligados na localização de Anderson, reproduzimos o caso com desordem composicional[21]. Validamos o nosso código computacional ao observar que a função de onda não mais se estende balisticamente com o tempo e que surge o caráter não monotônico na localização de Anderson em relação à interação entre os elétrons presente na literatura.

Nossos resultados investigando a influência da interação elétron-elétron na localização de Anderson oriunda da desordem estrutural[27], isto é, de uma cadeia composta por íons que estão espaçados diferentemente entre si, mostraram a mesma influência não monotônica da localização de Anderson. Esse comportamento surge em função da interação coulombiana que, ao prepararmos os estados no mesmo sítio, favorece o acesso do sistema aos estados ligados que promovem o movimento coerente das partículas que é, para valores de interação intermediários e fortes, restringido pela grande diferença de

energia entre os estados ligados e não ligados, sugerindo que este é um caráter global em relação à desordem.

Reproduzimos também o caso de dois elétrons sob ação de campo elétrico constante [28], em que mostramos o dobramento da frequência que ocorre em virtude dos estados ligados que promovem uma alta probabilidade de dupla ocupação dos elétrons para valores de interação pequenos e intermediários, conforme o a literatura, mostrando que um sistema de baixa densidade eletrônica na presença de campo elétrico pode apresentar uma nova fenomenologia para as oscilações de Bloch diferente do que se observou até então para sistemas de muitos corpos onde a interação destrói o comportamento oscilatório da função de onda.

Também validamos nosso código computacional ao reproduzir o caso de interação não-local em rede cristalina[100] que tem origem no amortecimento da blindagem eletrônica para elétrons que estão em sítios vizinhos. Resgatamos o surgimento de uma nova sub-banda de estados ligados devido à interação não-local que suscita o aumento da probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos observado no artigo de referência.

Por fim, nossos resultados sobre a influência da interação não-local nas oscilações de Bloch revelaram a possibilidade de conservar o dobramento da frequência de Bloch para valores de interação intermediários e altos, diferindo do caso reproduzido sem interação não-local que apresenta o dobramento apenas para valores pequenos de interação. Este fenômeno é causado pela sub-banda de estados ligados relacionada à interação amortecida que aumenta a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos para valores de interações maiores.

Futuramente pretendemos dar continuidade ao nosso estudo de dois elétrons interagentes não-localmente na presença de campo externo investigando outros valores de interação amortecida e outros valores de distância inicial dos elétrons d_0 a fim de caracterizar melhor a fenomenologia encontrada.

REFERÊNCIAS

- [1] Joseph D. Martin. When condensed-matter physics became king. *Physics Today*, 72(1):30–37, January 2019.
- [2] F. Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, 52(7):555–600, Jul 1929.
- [3] P.W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.
- [4] N.F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(7):416, 1949.
- [5] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42:673–676, Mar 1979.
- [6] L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir, and H. Bouchiat. Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents. *Phys. Rev. Lett.*, 64:2074–2077, Apr 1990.
- [7] N.F. Mott and R. Peierls. Discussion of the paper by de boer and verwey. *Proceedings of the Physical Society*, 49(4S):72, 1937.
- [8] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 276(1365):238–257, 1963.
- [9] Electron correlations in narrow energy bands. ii. the degenerate band case. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 277(1369):237–259, 1964.
- [10] Electron correlations in narrow energy bands iii. an improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 281(1386):401–419, 1964.
- [11] Elliott H. Lieb and Werner Liniger. Exact analysis of an interacting bose gas. i. the general solution and the ground state. *Phys. Rev.*, 130:1605–1616, May 1963.

- [12] Elliott H. Lieb and F. Y. Wu. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 20:1445–1448, Jun 1968.
- [13] Elliott H. Lieb and F. Y. Wu. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 20:1445–1448, Jun 1968.
- [14] Peter Henseler, Johann Kroha, and Boris Shapiro. Static screening and delocalization effects in the hubbard-anderson model. *Phys. Rev. B*, 77:075101, Feb 2008.
- [15] E Gambetti-Césare, D Weinmann, R. A Jalabert, and Ph Brune. Disorder-induced enhancement of the persistent current for strongly interacting electrons in one-dimensional rings. *Europhysics Letters (EPL)*, 60(1):120–126, oct 2002.
- [16] A. Habibi, E. Adibi, and S. A. Jafari. Strong-coupling perturbative study of the disordered Hubbard model on honeycomb lattice. *ArXiv e-prints*, June 2018.
- [17] D.L. Shepelyansky. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Phys. Rev. Lett.*, 73:2607–2610, Nov 1994.
- [18] A. Müller-Groeling, H.A. Weidenmüller, and C.H. Lewenkopf. Interacting electrons in mesoscopic rings. *EPL (Europhysics Letters)*, 22(3):193, 1993.
- [19] M. Abraham and R. Berkovits. Persistent currents in an interacting 1d disordered ring: Manifestations of the mott-hubbard transition. *Phys. Rev. Lett.*, 70:1509–1512, Mar 1993.
- [20] G. Bouzerar, D. Poilblanc, and G. Montambaux. Persistent currents in one-dimensional disordered rings of interacting electrons. *Phys. Rev. B*, 49:8258–8262, Mar 1994.
- [21] W.S. Dias and M.L. Lyra. Non monotonic influence of hubbard interaction on the anderson localization of two-electron wavepackets. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 411:35 – 41, 2014.
- [22] A. Habibi, E. Adibi, and S. A. Jafari. Strong-coupling perturbative study of the disordered Hubbard model on honeycomb lattice. *ArXiv e-prints*, June 2018.

- [23] E. Gambetti-Césare, D. Weinmann, R.A. Jalabert, and Ph. Brune. Disorder-induced enhancement of the persistent current for strongly interacting electrons in one-dimensional rings. *EPL (Europhysics Letters)*, 60(1):120, 2002.
- [24] K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt. Mott-hubbard transition versus anderson localization in correlated electron systems with disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 94:056404, Feb 2005.
- [25] M.E. Pezzoli and F. Becca. Ground-state properties of the disordered hubbard model in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 81:075106, Feb 2010.
- [26] Filippo Stellin and Giuliano Orso. Absence of two-body delocalization transitions in the two-dimensional anderson-hubbard model, 2020.
- [27] Michele. B. Coêlho and W.S. Dias. Two-particles bounded states as a mechanism to weaken the anderson localization in systems with structural disorder. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, page 114371, 2020.
- [28] W. S. Dias, E. M. Nascimento, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura. Frequency doubling of bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field. *Phys. Rev. B*, 76:155124, Oct 2007.
- [29] W.S. Dias, M.L. Lyra, and F.A.B.F. [de Moura]. The role of hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons. *Physics Letters A*, 374(44):4554 – 4558, 2010.
- [30] W. S. Dias, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra. Quantum entanglement and drifting generated by an ac field resonant with frequency-doubled bloch oscillations of correlated particles. *Phys. Rev. A*, 93:023623, Feb 2016.
- [31] A.R.C. Buarque and W.S. Dias. Unidirectional quantum walk of two correlated particles: Manipulating bound-pair and unbound wave-packet components. *Physics Letters A*, 381(37):3173 – 3177, 2017.
- [32] Giacomo Corrielli, Andrea Crespi, Giuseppe Della Valle, Stefano Longhi, and Roberto Osellame. Fractional bloch oscillations in photonic lattices. *Nature Communications*, 4(1):1555, 2013.

- [33] Philipp M. Preiss, Ruichao Ma, M. Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, Philip Zupancic, Yoav Lahini, Rajibul Islam, and Markus Greiner. Strongly correlated quantum walks in optical lattices. *Science*, 347(6227):1229–1233, 2015.
- [34] DIAS Wandearley. *Propriedades de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade na presença de interação*. PhD thesis, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 2011.
- [35] W.S. Dias, M.L. Lyra, and F.A.B.F. de Moura. The role of hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons. *Physics Letters A*, 374(44):4554 – 4558, 2010.
- [36] J.J. Thomson. Cathode rays. *The Electrician*, 39, 1897.
- [37] P. Drude. Zur elektronentheorie der metalle. *Annalen der Physik*, 306(3):566–613.
- [38] P. Drude. Zur elektronentheorie der metalle; ii. teil. galvanomagnetische und thermomagnetische effecte. *Annalen der Physik*, 308(11):369–402.
- [39] W. Bragg and L. Bragg. The reflection of x-rays by crystals. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 88(605):428–438, 1913.
- [40] ASHCROFT Neil W. and MERMIN N. David. **Solid State Physics**. Brooks Cole, 1976.
- [41] DIAS Wandearley. Propriedades de transporte em sistemas de baixa-dimensionalidade. Disponível em: <<https://drive.google.com/file/d/0B2dxvaBDM5KQaENGQXhOeGdZNUk/view>>, Acesso em: 19 mar 2018.
- [42] School Physics. Semiconductors. Disponível em: <<http://www.schoolphysics.co.uk/>>, Acesso em: 20 mar 2018.
- [43] D.J. Thouless. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Physics Reports*, 13(3):93 – 142, 1974.
- [44] J.D. Maynard. Acoustical analogs of condensed-matter problems. *Rev. Mod. Phys.*, 73:401–417, May 2001.

- [45] M.C. W. van Rossum and Th.M. Nieuwenhuizen. Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy, and diffusion. *Rev. Mod. Phys.*, 71:313–371, Jan 1999.
- [46] O. Morsch and M. Oberthaler. Dynamics of bose-einstein condensates in optical lattices. *Rev. Mod. Phys.*, 78:179–215, Feb 2006.
- [47] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect. Direct observation of anderson localization of matter waves in a controlled disorder. *Nature*, 453:891, Jun 2008.
- [48] P. Dean. Vibrations of glass-like disordered chains. *Proceedings of the Physical Society*, 84(5):727, 1964.
- [49] A.J. Bray and M.A. Moore. Influence of dissipation on quantum coherence. *Phys. Rev. Lett.*, 49:1545–1549, Nov 1982.
- [50] Patrick A. Lee and T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, 57:287–337, Apr 1985.
- [51] N.F. Mott and W.D. Twose. The theory of impurity conduction. *Advances in Physics*, 10(38):107–163, 1961.
- [52] E. Abrahams and T.V. Ramakrishnan. *J. Non-Cryst.*, 35:15, 1980.
- [53] L.P. Gor'kov, A.I. Larkin, and D.E. Khmel'nitskii. Particle conductivity in a two-dimensional random potential. *JETP Lett.*, 30:228–232, 1979.
- [54] F.A.B.F. de Moura and M.L. Lyra. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3735–3738, Oct 1998.
- [55] M. Griniasty and S. Fishman. Localization by pseudorandom potentials in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 60:1334–1337, Mar 1988.
- [56] H.-L. Wu and P. Phillips. Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.*, 66:1366–1369, Mar 1991.
- [57] A. Sánchez, E. Maciá, and F. Domínguez-Adame. Suppression of localization in kronig-penney models with correlated disorder. *Phys. Rev. B*, 49:147–157, Jan 1994.

- [58] J.H. de Boer and E.J.W. Verwey. Semi-conductors with partially and with completely filled 3 d -lattice bands. *Proceedings of the Physical Society*, 49(4S):59, 1937.
- [59] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura. Metal-insulator transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 70:1039–1263, Oct 1998.
- [60] D. Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner, and P. Zoller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3108–3111, Oct 1998.
- [61] D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, and K. Frahm. $h/2e$ oscillations for correlated electron pairs in disordered mesoscopic rings. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1598–1601, Aug 1995.
- [62] K. Frahm, A. Müller-Groeling, and J.-L. Pichard. Effective σ model formulation for two interacting electrons in a disordered metal. *Phys. Rev. Lett.*, 76:1509–1512, Feb 1996.
- [63] Y. Imry. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *EPL (Europhysics Letters)*, 30(7):405, 1995.
- [64] Krzysztof Byczuk, Walter Hofstetter, and Dieter Vollhardt. Mott-hubbard transition versus anderson localization in correlated electron systems with disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 94:056404, Feb 2005.
- [65] Maria Elisabetta Pezzoli and Federico Becca. Ground-state properties of the disordered hubbard model in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 81:075106, Feb 2010.
- [66] F. Claro, J.F. Weisz, and S. Curilef. Interaction-induced oscillations in correlated electron transport. *Phys. Rev. B*, 67:193101, May 2003.
- [67] A.R.C. Buarque and W.S. Dias. Creation and mobility of self-trapped electronic states in nonlinear chains. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 63:365 – 372, 2018.
- [68] Filippo Stellin and Giuliano Orso. Mobility edge of two interacting particles in three-dimensional random potentials. *Phys. Rev. B*, 99:224209, Jun 2019.

- [69] I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, and D. G. Polyakov. Interacting electrons in disordered wires: Anderson localization and low- t transport. *Phys. Rev. Lett.*, 95:206603, Nov 2005.
- [70] D.M. Basko, I.L. Aleiner, and B.L. Altshuler. Metal–insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states. *Annals of Physics*, 321(5):1126–1205, May 2006.
- [71] Rahul Nandkishore and David A. Huse. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 6(1):15–38, March 2015.
- [72] Dmitry A. Abanin, Ehud Altman, Immanuel Bloch, and Maksym Serbyn. Colloquium: Many-body localization, thermalization, and entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, 91:021001, May 2019.
- [73] S A Parameswaran and Romain Vasseur. Many-body localization, symmetry and topology. *Reports on Progress in Physics*, 81(8):082501, July 2018.
- [74] E. Gambetti. Effect of electronic interactions on the persistent current in one-dimensional disordered rings. *Phys. Rev. B*, 72:165338, Oct 2005.
- [75] Wannier function. Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/Wannier_function>, Acesso em: 2 jul 2018.
- [76] P. E. de Brito, E. S. Rodrigues, and H. N. Nazareno. Two interacting electrons in one-dimensional deterministic aperiodic systems: Fibonacci and thue-morse lattices. *Phys. Rev. B*, 73:014301, Jan 2006.
- [77] DIAS Wandearley. Dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas e aperiódicas: Efeitos de campo elétrico. Master’s thesis, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 2007.
- [78] J. K. Freericks, V. M. Turkowski, and V. Zlatić. Nonequilibrium dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. Lett.*, 97:266408, Dec 2006.
- [79] Andreas Buchleitner and Andrey R. Kolovsky. Interaction-induced decoherence of atomic bloch oscillations. *Phys. Rev. Lett.*, 91:253002, Dec 2003.

- [80] Felix Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, 52(7):555–600, 1929.
- [81] Gregory H. Wannier. Possibility of a zener effect. *Phys. Rev.*, 100:1227–1227, Nov 1955.
- [82] Gregory H. Wannier. Possibility of a zener effect. *Phys. Rev.*, 101:1835–1835, Mar 1956.
- [83] Gregory H. Wannier. Wave functions and effective hamiltonian for bloch electrons in an electric field. *Phys. Rev.*, 117:432–439, Jan 1960.
- [84] Gregory H. Wannier. Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields. *Rev. Mod. Phys.*, 34:645–655, Oct 1962.
- [85] D. H. Dunlap and V. M. Kenkre. Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field. *Phys. Rev. B*, 34:3625–3633, Sep 1986.
- [86] F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 91:197402, Nov 2003.
- [87] Karl Leo, Peter Haring Bolivar, Frank Brüggemann, Ralf Schwedler, and Klaus Köhler. Observation of bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Solid State Communications*, 84(10):943 – 946, 1992.
- [88] Karl Leo. Interband optical investigation of bloch oscillations in semiconductor superlattices. *Semiconductor Science and Technology*, 13(3):249–263, mar 1998.
- [89] Karl Leo. Interband optical investigation of bloch oscillations in semiconductor superlattices. *Semiconductor Science and Technology*, 13(7):837–837, jul 1998.
- [90] V. Agarwal, J. A. del Río, G. Malpuech, M. Zamfirescu, A. Kavokin, D. Coquillat, D. Scalbert, M. Vladimirova, and B. Gil. Photon bloch oscillations in porous silicon optical superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 92:097401, Mar 2004.
- [91] Nianduan Lu, Ling Li, Di Geng, and Ming Liu. A review for polaron dependent charge transport in organic semiconductor. *Organic Electronics*, 61:223 – 234, 2018.

- [92] Wei Wang, Guangwei Xu, M. Delwar H. Chowdhury, Hong Wang, Jae Kwang Um, Zhuoyu Ji, Nan Gao, Zhiwei Zong, Chong Bi, Congyan Lu, Nianduan Lu, Writam Banerjee, Jiafeng Feng, Ling Li, Andrey Kadashchuk, Jin Jang, and Ming Liu. Electric field modified arrhenius description of charge transport in amorphous oxide semiconductor thin film transistors. *Phys. Rev. B*, 98:245308, Dec 2018.
- [93] Benjamin M. Fregoso. Bulk photovoltaic effects in the presence of a static electric field. *Phys. Rev. B*, 100:064301, Aug 2019.
- [94] V. P. Amin and M. D. Stiles. Spin transport at interfaces with spin-orbit coupling: Formalism. *Phys. Rev. B*, 94:104419, Sep 2016.
- [95] Robert Peters and Youichi Yanase. Strong enhancement of the edelstein effect in f -electron systems. *Phys. Rev. B*, 97:115128, Mar 2018.
- [96] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah, D. A. B. Miller, J. E. Cunningham, T. Meier, G. von Plessen, A. Schulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink. Optical investigation of bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. B*, 46:7252–7255, Sep 1992.
- [97] Karl Leo, Peter Haring Bolivar, Frank Brüggemann, Ralf Schwedler, and Klaus Köhler. Observation of bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Solid State Communications*, 84(10):943 – 946, 1992.
- [98] Christian Waschke, Hartmut G. Roskos, Ralf Schwedler, Karl Leo, Heinrich Kurz, and Klaus Köhler. Coherent submillimeter-wave emission from bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, 70:3319–3322, May 1993.
- [99] T. Dekorsy, P. Leisching, K. Köhler, and H. Kurz. Electro-optic detection of bloch oscillations. *Phys. Rev. B*, 50:8106–8109, Sep 1994.
- [100] A.S. Peixoto and W.S. Dias. The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk. *Solid State Communications*, 242:68 – 73, 2016.

APÊNDICE A – PROVA DO TEOREMA DE BLOCH

Vamos fazer uma demonstração do teorema de Bloch. Para isso definimos que para cada vetor da rede de Bravais \vec{R} o operador translação T_R atuando em qualquer função $f(\vec{r})$ desloca o argumento e, \vec{R} : $T_R f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$. Uma vez que o hamiltoniano é periódico, temos

$$T_R H \psi = H(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) \quad (57)$$

$$= H(\vec{r}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) \quad (58)$$

$$= H T_R \psi \quad (59)$$

que é válido para toda função ψ , logo o operador T_R e o hamiltoniano comutam:

$$T_R H = H T_R \quad (60)$$

Além disso, a ordem ao aplicar duas translações sucessivas não importa, uma vez que para qualquer ψ vale o seguinte

$$T_R T_{R'} \psi(\vec{r}) = T_{R'} T_R \psi(\vec{r}) \quad (61)$$

$$= \psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}') \quad (62)$$

portanto,

$$T_R T_{R'} = T_{R'} T_R \quad (63)$$

$$= T_{R+R'} \quad (64)$$

Das relações das equações (60) e (64) sabemos que T_R , para todos os vetores da rede de Bravais, e o hamiltoniano formam um conjunto de operadores comutadores. Pelo teorema fundamental da mecânica quântica, os autoestados do hamiltoniano podem ser escolhidos para serem simultaneamente de todos os T_R :

$$H \psi = E \psi \quad (65)$$

$$T_R \psi = c(\vec{R}) \psi \quad (66)$$

Os autovalores $c(\vec{R})$ são relacionados pela condição em (64):

$$T_{R'}T_R\psi = c(\vec{R})T_{R'}\psi = c(\vec{R})c(\vec{R}')\psi \quad (67)$$

$$T_{R'}T_R\psi = T_{\vec{R}+\vec{R}'}\psi = c(\vec{R} + \vec{R}')\psi \quad (68)$$

assim, eles têm que satisfazer

$$c(\vec{R} + \vec{R}') = c(\vec{R})c(\vec{R}') \quad (69)$$

Deixemos \vec{a}_i serem os três vetores primitivos da rede de Bravais, de modo que o vetor da rede é escrito por $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$. Podemos escrever $c(\vec{a}_i)$ na forma

$$c(\vec{a}_i) = e^{2\pi i x_i} \quad (70)$$

escolhendo adequadamente x_i . Para aplicações sucessivas de (69), vem

$$c(\vec{R}) = c(n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3) \quad (71)$$

$$= c(n_1\vec{a}_1)c(n_2\vec{a}_2)c(n_3\vec{a}_3) \quad (72)$$

$$= c(\vec{a}_1)^{n_1}c(\vec{a}_2)^{n_2}c(\vec{a}_3)^{n_3} \quad (73)$$

$$= e^{2\pi i n_1 x_1} e^{2\pi i n_2 x_2} e^{2\pi i n_3 x_3} \quad (74)$$

$$= e^{2\pi i (n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3)} \quad (75)$$

e, uma vez que $\vec{k} = x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3$ e que \vec{b}_i são os vetores da rede recíproca que satisfazem $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_i = 2\pi\delta_{ij}$, a equação (75) é equivalente à

$$c(\vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (76)$$

Assim, mostramos que podemos escolher os autoestados ψ do hamiltoniano H tal que, para qualquer vetor da rede de Bravais \vec{R} ,

$$T_R\psi = \psi(\vec{r} + \vec{R}) \quad (77)$$

$$= c(\vec{R})\psi \quad (78)$$

$$= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}\psi \quad (79)$$

APÊNDICE B – DEMONSTRAÇÃO DO INTERVALO DE ENERGIA DO MODELO DE BLOCH

Mostraremos analiticamente o intervalo permitido de energia do elétron a partir da equação de Schrödinger:

$$H |\psi(\vec{r}, t_0)\rangle = E |\psi(\vec{r}, t_0)\rangle \quad (80)$$

e o princípio da decomposição espectral para um tempo fixado t_0 qualquer (caso estacionário), nos permite decompor a função de onda $|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle$ como combinação linear dos orbitais atômicos $|n\rangle$ usando a representação de Wannier:

$$|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle = \sum_n \varphi_n |n\rangle \quad (81)$$

de modo que

$$H \sum_n \varphi_n |n\rangle = E \sum_n \varphi_n |n\rangle \quad (82)$$

O hamiltoniano que usamos para descrever a interação de um elétron em uma rede unidimensional de átomos é

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| - J \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n\rangle \langle n-1|) \quad (83)$$

onde ϵ_n é a energia de acoplamento do elétron no sítio n e J é a energia de *hopping* para primeiros vizinhos. Como estamos tratando do caso cristalino, os sítios são igualmente espaçados, portanto a energia de *hopping* é igual para toda a cadeia.

Substituindo o hamiltoniano da eq. 83 na equação 82, temos

$$\begin{aligned} & \left[\sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| - J \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n\rangle \langle n-1|) \right] \sum_{n'} \varphi_{n'} |n'\rangle = E \sum_{n'} \varphi_{n'} |n'\rangle \\ & \left[\sum_{n,n'} \epsilon_n \varphi_{n'} |n\rangle \langle n|n'\rangle - J \sum_{n,n'} (\varphi_{n'} |n\rangle \langle n+1|n'\rangle + \varphi_n |n'\rangle \langle n-1|n'\rangle) \right] = E \sum_{n'} \varphi_{n'} |n'\rangle \end{aligned} \quad (84)$$

como $\{|n\rangle\}$ é um conjunto de vetores ortonormais,

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'} \quad (85)$$

então, aplicando $\langle\psi|$, temos a relação de recorrência

$$\begin{aligned} \left[\sum_{n,n'} \epsilon_n \varphi_{n'} |n\rangle \delta_{n,n'} - J \sum_{n,n'} (\varphi_{n'} |n\rangle \delta_{n+1,n'} + \varphi_{n'} |n\rangle \delta_{n-1,n'}) \right] &= E \sum_n \varphi_n |n\rangle \\ \sum_{n,n'} \epsilon_n \varphi_{n'}^* \varphi_n \langle n'|n\rangle - J \sum_{n,n'} \varphi_{n'}^* (\varphi_{n+1} \langle n'|n\rangle + \varphi_{n-1} \langle n'|n\rangle) &= E \sum_{n,n'} \varphi_{n'}^* \varphi_n \langle n'|n\rangle \\ \sum_n \epsilon_n \varphi_n^* \varphi_n - J \sum_n \varphi_n^* (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) &= E \sum_n \varphi_n^* \varphi_n \\ \epsilon_n \varphi_n - J (\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) &= E \varphi_n \end{aligned} \quad (86)$$

Considerando a cadeia cristalina, a energia potencial de acoplamento é a mesma para todo sítio, então vamos tomar como referência $\epsilon_n = \epsilon$. Logo,

$$E\varphi_n = \epsilon\varphi_n - J(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) \quad (87)$$

Lembrando que podemos escrever as funções de Bloch como uma série de Fourier, uma vez que estas são periódicas no espaço recíproco \vec{k} . Assim, vamos expressar as amplitudes na forma $\varphi_n = \varphi_0 e^{ikna}$, onde a é o vetor unitário da rede,

$$\begin{aligned} E\varphi_0 e^{ikna} &= \epsilon\varphi_0 e^{ikna} - J(\varphi_0 e^{ik(n+1)a} + \varphi_0 e^{ik(n-1)a}) \\ E\varphi_0 e^{ikna} &= \epsilon\varphi_0 e^{ikna} - J\varphi_0 e^{ikna} (e^{ika} + e^{-ika}) \\ E &= \epsilon - J(e^{ika} + e^{-ika}) \\ E &= \epsilon - J(2 \cos ka) \\ E &= \epsilon - 2J \cos ka \end{aligned} \quad (88)$$

Portanto, as energias permitidas estão dentro do intervalo $\epsilon - 2J \leq E \leq \epsilon + 2J$ assim, a banda de energia é deslocada pela energia de acoplamento do elétron ϵ e sua largura $4J$ depende do termo de *hopping*.

APÊNDICE C – DEMONSTRAÇÃO DA RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA DO HAMILTONIANO ANDERSON-HUBBARD

Vamos atuar o hamiltoniano de Anderson-Hubbard, dado pela equação 25

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s \epsilon_{n_s} c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + \sum_{n=1}^N \sum_s J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] \\ + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow}$$

na função de onda eletrônica $|\psi\rangle$:

$$H |\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_s \epsilon_{n_s} c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle + \sum_{n=1}^N \sum_s J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] |\psi\rangle \\ + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle \quad (89)$$

Uma vez que estamos considerando os elétrons com *spins* opostos e distinguíveis espacialmente, podemos expandir a função de onda na representação de Wannier (eq. 26)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle,$$

tal que, para o primeiro termo do lado direito da equação

$$H_1 |\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_s \epsilon_{n_s} c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle \\ = \sum_{n=1}^N \epsilon_{n_s} \left(c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \right) \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\ = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n=1}^N \epsilon_{n_s} \left(c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \right) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\ = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \quad (90)$$

o segundo termo é

$$\begin{aligned}
H_2 |\psi\rangle &= \sum_{n=1}^N \sum_s J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] |\psi\rangle \\
&= \sum_{n=1}^N J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{(n-1)_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} + c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \right] \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n=1}^N J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{(n-1)_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} + c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \right] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle \right]
\end{aligned} \tag{91}$$

e, finalmente, o terceiro termo é

$$\begin{aligned}
H_3 |\psi\rangle &= U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle \\
&= U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{92}$$

Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned}
H |\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle + (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right]
\end{aligned}$$

e o valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle$ é calculado:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | \left[J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle + (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right]
\end{aligned}$$

de modo que obtemos

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* & \left[J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\ & \left. + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + (\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}) \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \right] \end{aligned} \quad (93)$$

Assim, uma vez que temos a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12), podemos calcular seu valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle$, escrevendo a função de onda na representação de Wannier

$$\begin{aligned} \langle \psi | E | \psi \rangle &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \sum_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}} \varphi_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \langle n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow} | n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \rangle \\ &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}, \end{aligned} \quad (94)$$

temos

$$\begin{aligned} E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \left[J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\ & \left. + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + (\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}) \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \right] \end{aligned} \quad (95)$$

que nos dá a relação de recorrência para o caso estático:

$$\begin{aligned} E \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\ & \quad + (\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}) \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (96)$$

Semelhantemente, o valor esperado para a equação de Schrödinger dependente do tempo (eq. 29), $\langle \psi | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$, nos fornece a relação de recorrência para o caso dinâmico

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\ & \quad + (\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}) \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (97)$$

APÊNDICE D – DEMONSTRAÇÃO DO INTERVALO DE ENERGIA DO MODELO DE HUBBARD

No apêndice anterior chegamos em uma expressão para a equação de Schrödinger após aplicar o hamiltoniano de Hubbard (equação 96). Consideraremos o caso cristalino, de modo que $\epsilon_{\downarrow} = \epsilon_{\uparrow} = \epsilon$ e $J_{n'_s} = J$

$$E\varphi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} = J \left[\varphi_{(n+1)_{\uparrow},n_{\downarrow}} + \varphi_{(n-1)_{\uparrow},n_{\downarrow}} + \varphi_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \varphi_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}} \right] + (2\epsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}}) \varphi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} \quad (98)$$

Assumimos a transformação de coordenadas do centro de massa

$$\varphi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} = e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \quad (99)$$

e substituimos na equação acima para obter

$$Ee^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = J \left[e^{ik(n_{\uparrow}+1+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} + 1 - n_{\downarrow}) + e^{ik(n_{\uparrow}-1+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - 1 - n_{\downarrow}) \right. \\ \left. + e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow}+1)a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} - 1) + e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow}-1)a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + 1) \right] \\ + (2\epsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}}) e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$$

sendo a distância entre os elétrons $r = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ e dividindo a equação pro $e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}$, temos

$$E\phi(r) = J \left[e^{ika} \phi(r+1) + e^{-ika} \phi(r-1) + e^{ika} \phi(r-1) + e^{-ika} \phi(r+1) \right] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(r) \quad (100)$$

$$E\phi(r) = J \left[(e^{ika} + e^{-ika}) \phi(r+1) + (e^{-ika} + e^{ika}) \phi(r-1) \right] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(r) \\ = J (e^{ika} + e^{-ika}) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(r) \\ = 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(r) \quad (101)$$

Na ausência de interação, $U = 0$, podemos assumir $\phi(r) = e^{izr}$ e obtemos a banda de energia referente aos estados não-ligados

$$\begin{aligned}
Ee^{izra} &= 2J \cos(ka) [e^{iz(r+1)a} + e^{iz(r-1)a}] + 2\epsilon e^{izra} \\
&= 2J \cos(ka) e^{izra} (e^{iza} + e^{-iza}) + 2\epsilon e^{izra} \\
&= 4J \cos(ka) \cos(za) e^{izra} + 2\epsilon e^{izra}
\end{aligned} \tag{102}$$

dividindo a equação acima pelo fator e^{izra}

$$E = 4J \cos(ka) \cos(za) + 2\epsilon \tag{103}$$

de modo que as energias dos estados não-ligados estão dentro do intervalo $2\epsilon - 4J \leq E \leq 2\epsilon + 4J$. Semelhantemente ao caso de um elétron discutido no apêndice 5, vemos que a banda é deslocada em 2ϵ pela energia de acoplamento elétron-íon e sua largura é determinada pela energia de movimento do elétron para os primeiros vizinhos $8J$, que é duas vezes a largura do intervalo para o caso de um elétron, ou seja, soma a contribuição do *hopping* dos dois elétrons.

A fim de obtermos o intervalo de energia dos estados ligados, voltamos com a equação 101 para $r = 0$

$$\begin{aligned}
E\phi(r) &= 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(r) \\
E\phi(0) &= 2J \cos(ka) [\phi(1) + \phi(-1)] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(0) \\
&= 4J \cos(ka) \phi(1) + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(0) \\
&= 4J \cos(ka) \phi(1) + (2\epsilon + U) \phi(0)
\end{aligned} \tag{104}$$

em que assumimos que a função de onda é simétrica, isto é, contém paridade par $\phi(-r) = \phi(r)$. Além disso, vamos considerar que $\phi(r+1) = \lambda\phi(r)$

$$\begin{aligned}
E\phi(0) &= 4J \cos(ka) \lambda \phi(0) + (2\epsilon + U) \phi(0) \\
\Rightarrow \lambda &= \frac{E - 2\epsilon - U}{4J \cos(ka)}
\end{aligned} \tag{105}$$

Agora, encontraremos a realação para $r = 1$,

$$\begin{aligned}
E\phi(r) &= 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(r) \\
E\phi(1) &= 2J \cos(ka) [\phi(2) + \phi(0)] + (2\epsilon + U\delta_{r,0}) \phi(1) \\
E\lambda\phi(0) &= 2J \cos(ka) [\lambda^2\phi(0) + \phi(0)] + 2\epsilon\lambda\phi(0) \\
E\lambda &= 2J \cos(ka) (\lambda^2 + 1) + 2\epsilon\lambda
\end{aligned} \tag{106}$$

onde substituiremos o valor de λ encontrado na equação 105

$$E \frac{E - 2\epsilon - U}{4J \cos(ka)} = 2J \cos(ka) \left[\frac{(E - 2\epsilon - U)^2}{16J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] + 2\epsilon \frac{E - 2\epsilon - U}{4J \cos(ka)} \tag{107}$$

$$E^2 - 2E\epsilon - EU = 8J^2 \cos^2(ka) \left[\frac{E^2 - 2E(2\epsilon + U) + (2\epsilon + U)^2}{16J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] + 2E\epsilon - 4\epsilon^2 - 2U\epsilon$$

colocando os termos que possuem E à esquerda,

$$\begin{aligned}
E^2 - E(4\epsilon + U) &= \frac{1}{2} [E^2 - 2E(2\epsilon + U) + (2\epsilon + U)^2] + 8J^2 \cos^2(ka) - 4\epsilon^2 - 2U\epsilon \\
2E^2 - 2E(4\epsilon + U) &= E^2 - 2E(2\epsilon + U) + (2\epsilon + U)^2 + 16J^2 \cos^2(ka) - 8\epsilon^2 - 4U\epsilon \\
E^2 - 4E\epsilon &= 4\epsilon^2 + 4U\epsilon + U^2 + 16J^2 \cos^2(ka) - 8\epsilon^2 - 4U\epsilon \\
E^2 - 4E\epsilon &= 16J^2 \cos^2(ka) + U^2 - 4\epsilon^2
\end{aligned}$$

Logo, a expressão para a energia é

$$E^2 - 4E\epsilon - U^2 + 4\epsilon^2 - 16J^2 \cos^2(ka) = 0 \tag{108}$$

e os valores de energia são

$$\begin{aligned}
E &= 2\epsilon \pm \sqrt{4\epsilon^2 + U^2 - 4\epsilon^2 + 16J^2 \cos^2(ka)} \\
&= 2\epsilon \pm \sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}
\end{aligned} \tag{109}$$

sendo que o sinal \pm deve ser o mesmo de U . Como consideramos dois elétrons, a interação é repulsiva, logo $U > 0$. Dessa forma, temos que as energias dos estados ligados estão no intervalo $2\epsilon + U \leq E \leq 2\epsilon + \sqrt{U^2 + 16J^2}$. Vemos novamente o deslocamento da banda causado pela energia de ligação elétron-íon ϵ e a dependência da largura da banda com o termo de *hopping*.

Fazendo a consideração $\epsilon = 0$, retornamos ao resultado previsto na literatura [66]:

Tabela 1: Limites para as bandas de energia de estados não-ligados e ligados para o problema de dois elétrons interagentes.

Banda de Estados	Intervalo de Energia
Não-Ligados	$-4J \leq E \leq 4J$
Ligados	$U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$

APÊNDICE E – DEMONSTRAÇÃO DA RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA DO HAMILTONIANO ANDERSON-HUBBARD ESTENDIDO

Vamos atuar o hamiltoniano de Anderson-Hubbard estendido, isto é, com interação coulombiana V entre elétrons que estão em sítios vizinhos, dado pela equação 51

$$\begin{aligned}
 H |\psi\rangle = & \sum_{n=1}^N \sum_s \epsilon_{n_s} c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle + \sum_{n=1}^N \sum_s J_{n'_s} \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] |\psi\rangle + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle \\
 & + V \sum_{n=1}^N \left[c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{(n+1)_\downarrow} + c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{(n-1)_\downarrow} \right] |\psi\rangle
 \end{aligned} \tag{110}$$

na função de onda eletrônica $|\psi\rangle$ na representação de Wannier (eq. 26) uma vez que estamos considerando os elétrons com *spins* opostos e distinguíveis espacialmente

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle,$$

tal que, do apêndice 5, sabemos o primeiro termo do lado direito da equação acima (equação 90)

$$H_1 |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \tag{111}$$

o segundo termo (equação 112) é

$$\begin{aligned}
 H_2 |\psi\rangle = & \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle \right. \\
 & \left. + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle \right],
 \end{aligned} \tag{112}$$

o terceiro termo (equação 92) é

$$H_3 |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \tag{113}$$

e, assim, nos falta apenas calcular o quarto termo, da interação entre os primeiros vizinhos

$$\begin{aligned}
H_4 |\psi\rangle &= V \sum_{n=1}^N \left[c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow} \right] |\psi\rangle \\
&= V \sum_{n=1}^N \left[c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow} \right] \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= V \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n=1}^N \left[c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow} \right] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= V \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle \right]
\end{aligned} \tag{114}$$

Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned}
H |\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left\{ J_{n_\uparrow} |(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right. \\
&\quad + J_{n_\downarrow} |n_\uparrow, (i+1)_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle + V \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle \right. \\
&\quad \left. \left. + \delta_{n_\uparrow, (n-1)\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle \right] + (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right\}
\end{aligned}$$

e o valor esperado $\langle\psi|H|\psi\rangle$ é calculado:

$$\begin{aligned}
\langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \left\{ J_{n_\uparrow} |(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right. \\
&\quad + J_{n_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle + V \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle \right. \\
&\quad \left. \left. + \delta_{n_\uparrow, (n-1)\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle \right] + (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right\}
\end{aligned}$$

de modo que obtemos

$$\begin{aligned}
\langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* \left[J_{n_\uparrow} \varphi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + J_{(n-1)_\uparrow} \varphi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + J_{n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} \right. \\
&\quad + J_{(n-1)_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} + V \left(\delta_{n_\uparrow, (n+1)\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)\downarrow} \right) \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \\
&\quad \left. + (\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \right]
\end{aligned} \tag{115}$$

Assim, uma vez que temos a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12), podemos calcular seu valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle$, escrevendo a função de onda na representação de Wannier

$$\begin{aligned} \langle \psi | E | \psi \rangle &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \sum_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}} \varphi_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \langle n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow} | n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \rangle \\ &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}, \end{aligned} \quad (116)$$

temos

$$\begin{aligned} E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \left[J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\ &\quad \left. + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + V \left(\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right) \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \right. \\ &\quad \left. + (\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}) \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \right] \end{aligned} \quad (117)$$

que nos dá a relação de recorrência para o caso estático:

$$\begin{aligned} E \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\ &\quad + \left[\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + V \left(\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right) \right] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (118)$$

Semelhantemente, o valor esperado para a equação de Schrödinger dependente do tempo (eq. 29), $\langle \psi | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$, nos fornece a relação de recorrência para o caso dinâmico

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\ &\quad + \left[\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + U \delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + V \left(\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right) \right] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (119)$$

APÊNDICE F – DEMONSTRAÇÃO DO INTERVALO DE ENERGIA DO MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO

No apêndice anterior chegamos em uma expressão para a equação de Schrödinger após aplicar o hamiltoniano de Hubbard estendido (equação 118). Consideraremos o caso cristalino, ou seja, $\epsilon_{\downarrow} = \epsilon_{\uparrow} = \epsilon$ e $J_{n'_s} = J$,

$$E\varphi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} = J \left[\varphi_{(n+1)_{\uparrow},n_{\downarrow}} + \varphi_{(n-1)_{\uparrow},n_{\downarrow}} + \varphi_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \varphi_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}} \right] + \left[2\epsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} + V \left(\delta_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}} \right) \right] \varphi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} \quad (120)$$

Assumimos a transformação de coordenadas do centro de massa

$$\varphi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} = e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \quad (121)$$

e substituimos na equação acima para obter

$$Ee^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = J \left[e^{ik(n_{\uparrow}+1+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} + 1 - n_{\downarrow}) + e^{ik(n_{\uparrow}-1+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - 1 - n_{\downarrow}) + e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow}+1)a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} - 1) + e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow}-1)a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + 1) \right] + V \left[\delta_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}} \right] e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) + (2\epsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}}) e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a} \phi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$$

sendo a distância entre os elétrons $r = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ e dividindo a equação por $e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}$, temos

$$E\phi(r) = J \left[e^{ika} \phi(r+1) + e^{-ika} \phi(r-1) + e^{ika} \phi(r-1) + e^{-ika} \phi(r+1) \right] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) \quad (122)$$

$$E\phi(r) = J (e^{ika} + e^{-ika}) [(r+1) + \phi(r-1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) = 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) \quad (123)$$

Na ausência de interação, $U = 0 = V$, podemos assumir $\phi(r) = e^{izr}$ e obtemos a

banda de energia referente aos estados não-ligados

$$\begin{aligned}
Ee^{izr a} &= 2J \cos(ka) [e^{iz(r+1)a} + e^{iz(r-1)a}] + 2\epsilon e^{izr a} \\
&= 2J \cos(ka) e^{izr a} (e^{iza} + e^{-iza}) + 2\epsilon e^{izr a} \\
&= 4J \cos(ka) \cos(za) e^{izr a} + 2\epsilon e^{izr a}
\end{aligned} \tag{124}$$

dividindo a equação acima pelo fator $e^{izr a}$

$$E = 4J \cos(ka) \cos(za) + 2\epsilon \tag{125}$$

de modo que as energias dos estados não-ligados estão dentro do intervalo $2\epsilon - 4J \leq E \leq 2\epsilon + 4J$, como no caso de dois elétrons que interagem apenas no mesmo sítio (apêndice 5). Semelhantemente ao caso de um e dois elétrons discutidos nos apêndices 5 e 5, vemos que a banda é deslocada em 2ϵ pela energia de acoplamento elétron-íon e sua largura é determinada pela energia de movimento do elétron para os primeiros vizinhos $8J$.

A fim de obtermos o intervalo de energia dos estados ligados, voltamos com a equação 123 para $r = 0$

$$\begin{aligned}
E\phi(r) &= 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) \\
E\phi(0) &= 2J \cos(ka) [\phi(1) + \phi(-1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(0) \\
&= 4J \cos(ka) \phi(1) + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(0) \\
&= 4J \cos(ka) \phi(1) + (2\epsilon + U) \phi(0)
\end{aligned} \tag{126}$$

em que assumimos que a função de onda é simétrica, isto é, contém paridade par $\phi(-r) = \phi(r)$. Além disso, vamos considerar que $\phi(r+1) = \lambda\phi(r)$

$$\begin{aligned}
E\phi(0) &= 4J\lambda \cos(ka) \phi(0) + (2\epsilon + U) \phi(0) \\
\Rightarrow \lambda &= \frac{E - 2\epsilon - U}{4J \cos(ka)}
\end{aligned} \tag{127}$$

Note que é o mesmo valor encontrado para o caso estudado de dois elétrons com interação apenas local (apêndice 5), o que está coerente, pois para $r = 0$ não existe

contribuição da interação para primeiros vizinhos. Agora, encontraremos a relação para $r = 1$,

$$\begin{aligned}
E\phi(r) &= 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) \\
E\phi(1) &= 2J \cos(ka) [\phi(2) + \phi(0)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(1) \\
E\lambda\phi(0) &= 2J \cos(ka) [\lambda^2\phi(0) + \phi(0)] + (2\epsilon + V)\lambda\phi(0) \\
E\lambda &= 2J \cos(ka) (\lambda^2 + 1) + (2\epsilon + V)\lambda
\end{aligned} \tag{128}$$

onde substituiremos o valor de λ encontrado na equação 127

$$E \frac{E - 2\epsilon - U}{4J \cos(ka)} = 2J \cos(ka) \left[\frac{(E - 2\epsilon - U)^2}{16J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] + (2\epsilon + V) \frac{E - 2\epsilon - U}{4J \cos(ka)} \tag{129}$$

Multiplicamos os termos em evidência para abrir a equação e multiplicamos tudo pelo fator $4J \cos(ka)$, obtendo

$$\begin{aligned}
E^2 - 2E\epsilon - EU &= 8J^2 \cos^2(ka) \left[\frac{E^2 - 2E(2\epsilon + U) + (2\epsilon + U)^2}{16J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] \\
&\quad + 2E\epsilon + VE - 4\epsilon^2 - 2U\epsilon - 2V\epsilon - VU
\end{aligned}$$

que pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
E^2 - E(4\epsilon + U + V) &= \frac{1}{2} [E^2 - 2E(2\epsilon + U) + (2\epsilon + U)^2] + 8J^2 \cos^2(ka) \\
&\quad - 4\epsilon^2 - 2U\epsilon - 2V\epsilon - VU
\end{aligned}$$

e que multiplicando por 2 fica

$$\begin{aligned}
2E^2 - 2E(4\epsilon + U + V) &= E^2 - 2E(2\epsilon + U) + (2\epsilon + U)^2 + 16J^2 \cos^2(ka) \\
&\quad - 8\epsilon^2 - 4U\epsilon - 4V\epsilon - 2VU
\end{aligned}$$

Passamos todos os argumentos que contém E para a esquerda para obter

$$\begin{aligned}
E^2 - 2(2\epsilon + V)E &= 4\epsilon^2 + 4U\epsilon + U^2 + 16J^2 \cos^2(ka) - 8\epsilon^2 - 4U\epsilon - 4V\epsilon - 2VU \\
&= 16J^2 \cos^2(ka) + U^2 - 4\epsilon^2 - 4V\epsilon - 2VU \\
&= 16J^2 \cos^2(ka) + U^2 - 4\epsilon^2 - 2V(2\epsilon + U)
\end{aligned}$$

Logo, a equação de segundo grau para a energia é

$$E^2 - 2(2\epsilon + V)E - U^2 + 4\epsilon^2 + 2V(2\epsilon + U) - 16J^2 \cos^2(ka) = 0 \quad (130)$$

e suas soluções são

$$\begin{aligned}
E &= 2\epsilon + V \pm \sqrt{(2\epsilon + V)^2 + U^2 - 4\epsilon^2 - 2V(2\epsilon + U) + 16J^2 \cos^2(ka)} \\
&= 2\epsilon + V \pm \sqrt{4\epsilon^2 + 4V\epsilon + V^2 + U^2 - 4\epsilon^2 - 4V\epsilon - 2VU + 16J^2 \cos^2(ka)} \\
&= 2\epsilon + V \pm \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}
\end{aligned} \quad (131)$$

sendo que o sinal \pm deve ser o mesmo de U . Como consideramos dois elétrons, a interação é repulsiva, logo $U > 0$. Dessa forma, temos que as energias dos estados ligados estão no intervalo $2\epsilon + U \leq E \leq 2\epsilon + V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$. Vemos novamente o deslocamento da banda causado pela energia de ligação elétron-íon ϵ e a dependência da largura da banda com o termo de *hopping*. Além disso, observamos que agora a banda de estados ligados é alterada pela interação não-local, o que causa o alargamento dela.

Para descobrirmos os limites da banda de estados ligados referentes à interação entre elétrons que ocupam sítios vizinhos, utilizamos a paridade ímpar da função de onda $\phi(-r) = -\phi(r)$, ou seja, uma vez que $\phi(r = 0)$ existe pois a função de onda é contínua(?), $\phi(0) = 0$. Além disso, usamos a relação citada anteriormente em que $\phi(r + 1) = \lambda\phi(r)$. Logo, a função para $r = 1$ fica

$$\begin{aligned}
E\phi(r) &= 2J \cos(ka) [\phi(r + 1) + \phi(r - 1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) \\
E\phi(1) &= 2J \cos(ka) [\phi(2) + \phi(0)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(1) \\
&= 2J \cos(ka)\lambda\phi(1) + (2\epsilon + V)\phi(1)
\end{aligned} \quad (132)$$

então

$$\begin{aligned}
 E &= 2\lambda J \cos(ka) + 2\epsilon + V \\
 \Rightarrow \lambda &= \frac{E - 2\epsilon - V}{2J \cos(ka)}
 \end{aligned} \tag{133}$$

Agora, resolvendo a equação para $r = 2$, vem

$$\begin{aligned}
 E\phi(r) &= 2J \cos(ka) [\phi(r+1) + \phi(r-1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(r) \\
 E\phi(2) &= 2J \cos(ka) [\phi(3) + \phi(1)] + [2\epsilon + U\delta_{r,0} + V(\delta_{r,1} + \delta_{r,-1})] \phi(2) \\
 E\lambda\phi(1) &= 2J \cos(ka) [\lambda^2\phi(1) + \phi(1)] + 2\epsilon\lambda\phi(1) \\
 E\lambda &= 2J \cos(ka) (\lambda^2 + 1) + 2\epsilon\lambda
 \end{aligned} \tag{134}$$

e substituindo a expressão encontrada para λ na equação 133, temos

$$E \frac{E - 2\epsilon - V}{2J \cos(ka)} = 2J \cos(ka) \left[\frac{(E - 2\epsilon - V)^2}{4J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] + 2\epsilon \frac{E - 2\epsilon - V}{2J \cos(ka)} \tag{135}$$

em que multiplicamos por $2J \cos(ka)$

$$E(E - 2\epsilon - V) = 4J^2 \cos^2(ka) \left[\frac{(E - 2\epsilon - V)^2}{4J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] + 2\epsilon(E - 2\epsilon - V) \tag{136}$$

que abrindo fica

$$\begin{aligned}
 E^2 - E(2\epsilon + V) &= (E - 2\epsilon - V)^2 + 4J^2 \cos^2(ka) + 2E\epsilon - 4\epsilon^2 - 2V\epsilon \\
 &= E^2 - 2E(2\epsilon + V) + (2\epsilon + V)^2 + 2E\epsilon - 4\epsilon^2 - 2V\epsilon + 4J^2 \cos^2(ka) \\
 &= E^2 - 2E(\epsilon + V) + 4\epsilon^2 + 4V\epsilon + V^2 - 4\epsilon^2 - 2V\epsilon + 4J^2 \cos^2(ka) \\
 &= E^2 - 2E(\epsilon + V) + V^2 + 2V\epsilon + 4J^2 \cos^2(ka)
 \end{aligned}$$

Passando os fatores com E para o lado esquerdo, vem

$$\begin{aligned}
 EV &= V^2 + 2V\epsilon + 4J^2 \cos^2(ka) \\
 \Rightarrow E &= 2\epsilon + V + \frac{4J^2 \cos^2(ka)}{V}
 \end{aligned}$$

Portanto, temos que as energias da sub-banda de estados ligados referentes à interação elétron-elétron não-local está dentro do intervalo $2\epsilon + V \leq E \leq 2\epsilon + V + 4J^2/V$. Observamos novamente o papel da energia de acoplamento dos elétrons aos íons ϵ deslocando a sub-banda enquanto a energia de *hopping* governa sua largura. Fazendo a consideração $\epsilon = 0$, retornamos ao resultado previsto na literatura [100]:

Tabela 2: Limites para as bandas de energia de estados não-ligados e ligados para o problema de dois elétrons interagentes na presença de interação não-local.

Banda de Estados	Intervalo de Energia
Não-Ligados	$-4J \leq E \leq 4J$
Ligados Interação Local	$U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$
Ligados Interação Não-Local	$V \leq E \leq V + 4J^2/V$

APÊNDICE G – DEMONSTRAÇÃO DA RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA DO HAMILTONIANO ANDERSON-HUBBARD COM CAMPO ELÉTRICO

Vamos atuar o hamiltoniano de Anderson-Hubbard sob ação de campo elétrico, dado pela equação 49

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \\ + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right]$$

na função de onda eletrônica $|\psi\rangle$:

$$H |\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle \\ + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] |\psi\rangle \quad (137)$$

Uma vez que estamos considerando os elétrons com *spins* opostos e distinguíveis espacialmente, podemos expandir a função de onda na representação de Wannier (eq. 26)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle,$$

tal que, para o primeiro termo do lado direito da equação

$$\begin{aligned}
H_1 |\psi\rangle &= \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF a \mathbf{n}_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle \\
&= \sum_{n=1}^N \left[(\epsilon_\uparrow + eF a \mathbf{n}_\uparrow) c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + (\epsilon_\downarrow + eF a \mathbf{n}_\downarrow) c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \right] \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[(\epsilon_\uparrow + eF a \mathbf{n}_\uparrow) c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + (\epsilon_\downarrow + eF a \mathbf{n}_\downarrow) c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \right] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \quad (138) \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (\epsilon_{n_\uparrow} + eF a n_\uparrow + \epsilon_{n_\downarrow} + eF a n_\downarrow) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eF a (n_\uparrow + n_\downarrow)] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle,
\end{aligned}$$

o segundo termo, já conhecemos, é

$$H_2 |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \quad (139)$$

assim como o terceiro termo,

$$\begin{aligned}
H_3 |\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle \right] \quad (140)
\end{aligned}$$

Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned}
H |\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left\{ J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle + [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eF a (n_\uparrow + n_\downarrow) + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right\}
\end{aligned}$$

e o valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle$ é calculado:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | \left\{ J_{n_\uparrow} \left| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} \left| (n-1)_\uparrow, n_\downarrow \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + J_{n_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n+1)_\downarrow \right\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} \left| n_\uparrow, (n-1)_\downarrow \right\rangle + [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} \right. \\
&\quad \left. + eF a (n_\uparrow + n_\downarrow) + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right\}
\end{aligned}$$

de modo que obtemos

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \left\{ J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\ \left. + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \right\} \end{aligned} \quad (141)$$

Assim, uma vez que temos a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12), podemos calcular seu valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle$, escrevendo a função de onda na representação de Wannier

$$\begin{aligned} \langle \psi | E | \psi \rangle &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \sum_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}} \varphi_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \langle n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow} | n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \rangle \\ &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}, \end{aligned} \quad (142)$$

temos

$$\begin{aligned} E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \left\{ J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\ \left. + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \right\} \end{aligned}$$

que nos dá a relação de recorrência para o caso estático:

$$\begin{aligned} E\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} = J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\ + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (143)$$

Semelhantemente, o valor esperado para a equação de Schrödinger dependente do tempo (eq. 29), $\langle \psi | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$, nos fornece a relação de recorrência para o caso dinâmico

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} = J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\ + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (144)$$

APÊNDICE H – DEMONSTRAÇÃO DA RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA DO HAMILTONIANO ANDERSON-HUBBARD ESTENDIDO COM CAMPO ELÉTRICO

Vamos atuar o hamiltoniano de Anderson-Hubbard estendido sob ação de campo elétrico, dado pela equação 53

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF\mathbf{a}\mathbf{n}_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} \\
 & + V \sum_{n=1}^N \left[c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{(n+1)_\downarrow} + c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{(n-1)_\downarrow} \right] \\
 & + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right]
 \end{aligned}$$

na função de onda eletrônica $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned}
 H |\psi\rangle = & \sum_{n=1}^N \sum_s (\epsilon_s + eF\mathbf{a}\mathbf{n}_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle \\
 & + V \sum_{n=1}^N \left[c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n+1)_\downarrow}^\dagger c_{(n+1)_\downarrow} + c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} c_{(n-1)_\downarrow}^\dagger c_{(n-1)_\downarrow} \right] |\psi\rangle \quad (145) \\
 & + J \sum_{n=1}^N \sum_s \left[c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s} \right] |\psi\rangle
 \end{aligned}$$

Uma vez que estamos considerando os elétrons com *spins* opostos e distinguíveis espacialmente, podemos expandir a função de onda na representação de Wannier (eq. 26)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle,$$

tal que, dos apêndices anteriores, temos que o primeiro termo do lado direito da equação é

$$H_1 |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow)] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \quad (146)$$

o segundo termo,

$$H_2 |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \quad (147)$$

enquanto que o terceiro termo é

$$H_3 |\psi\rangle = V \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle \right] \quad (148)$$

e, por fim, o quarto termo

$$H_4 |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left[J_{n_\uparrow} |(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right. \\ \left. + J_{n_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle \right], \quad (149)$$

Dessa forma, temos que

$$H |\psi\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \left\{ J_{n_\uparrow} |(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J_{n_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle \right. \\ \left. + J_{(n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle + [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow) + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right. \\ \left. + V \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle \right] \right\}$$

e o valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle$ é calculado:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \varphi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \varphi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | \left\{ J_{n_\uparrow} |(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\uparrow} |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle \right. \\ \left. + J_{n_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + J_{(n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle + [\epsilon_{n_\uparrow} + \epsilon_{n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow) \right. \\ \left. + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle + V \left[\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle \right] \right\}$$

de modo que obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} & \left\{ J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\
& + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \\
& \left. + V \left[\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right] \right\} \quad (150)
\end{aligned}$$

Assim, uma vez que temos a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 12), podemos calcular seu valor esperado $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle$, escrevendo a função de onda na representação de Wannier

$$\begin{aligned}
\langle \psi | E | \psi \rangle &= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \sum_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}} \varphi_{n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \langle n'_{\uparrow}, n'_{\downarrow} | n_{\uparrow}, n_{\downarrow} \rangle \\
&= E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}, \quad (151)
\end{aligned}$$

temos

$$\begin{aligned}
E \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= \sum_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}^* \left\{ J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \right. \\
& + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \\
& \left. + V \left[\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right] \right\}
\end{aligned}$$

que nos dá a relação de recorrência para o caso estático:

$$\begin{aligned}
E\varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} &= J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\
& + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \quad (152) \\
& + V \left[\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right]
\end{aligned}$$

Semelhantemente, o valor esperado para a equação de Schrödinger dependente do tempo (eq. 29), $\langle \psi | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$, nos fornece a relação de recorrência para o caso dinâmico

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} = & J_{n_{\uparrow}} \varphi_{(n+1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\uparrow}} \varphi_{(n-1)_{\uparrow}, n_{\downarrow}} + J_{n_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + J_{(n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \\
& + [\epsilon_{n_{\uparrow}} + \epsilon_{n_{\downarrow}} + eFa(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U\delta_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}}] \varphi_{n_{\uparrow}, n_{\downarrow}} \quad (153) \\
& + V \left[\delta_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \varphi_{n_{\uparrow}, (n-1)_{\downarrow}} \right]
\end{aligned}$$