



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física
Curso de Bacharelado em Física

MATHEUS FELIPE VIEIRA DE OLIVEIRA

**Dinâmica de Partículas com Interação Local e
Não-Local na Presença de um Campo Elétrico
Constante**

Maceió

2022

MATHEUS FELIPE VIEIRA DE OLIVEIRA

Dinâmica de Partículas com Interação Local e Não-Local na Presença de um Campo Elétrico Constante

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Física (IF) da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Física.

Orientador : Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias

Maceió

2022



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

Ata da Defesa do Trabalho de Conclusão de Curso do aluno **Matheus Felipe Vieira de Oliveira**, matrícula **17111051**, intitulado “**Dinâmica de Partículas com Interação Local e Não-Local na Presença de um Campo Elétrico Constante**”.

Às **08:30** horas do dia **três de março de dois mil e vinte e dois**, foi instalada na Sala de Seminários, no Instituto de Física da UFAL, Campus A. C. Simões, a sessão pública de defesa do Trabalho de Conclusão de Curso a qual se submeteu o aluno **Matheus Felipe Vieira de Oliveira** do Curso de Física Bacharelado. A banca foi composta pelos professores **Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias (Orientador do trabalho, IF-UFAL)**, **Anderson Rafael Correia Buarque da Silva** e **Frederico Salgueiro Passos (IFAL)**.

Os membros desta banca avaliaram o referido trabalho e conferiram-lhe a seguinte menção APROVADO, atribuindo ao mesmo, respectivamente, as notas (9,0); (9,00); (9,00), computando assim média 9,00 note e autorizando os trâmites legais. Por oportuno, tendo em vista a melhoria da qualidade do trabalho, a banca sugere a tomada das seguintes providências:

Estando todos de acordo, lavrou-se a presente Ata.

Maceió, 03 de março de 2022.

1º Examinador: Wandearley da Silva Dias

2º Examinador: Anderson Rafael C. Buarque da Silva

3º Examinador: Frederico S. Passos

Visto da Coordenação: Vinicius Manzoni Vieira

Prof. Vinicius Manzoni Vieira

Coordenador do Curso de Física Bacharelado

Portaria nº 65/2020 | DOU 07/04/2020

SIAPÉ: 2580000 | IF - UFAL

Agradecimentos

Agraço a minha família por todo apoio de sempre. Em especial a minha mãe, Mônica, e ao meu irmão, Joatas. Agradeço pelo amor, carinho e educação que fizeram de mim quem sou hoje.

Aos meus amores : Shakira (namorada) e Shelda (cunhada), por todo apoio e carinho ao longo desses 7 anos. Por todas as conversas e risadas. Por estarem comigo em todos os momentos bons e ruins. Por sempre me alegrarem, me ajudarem e aguentarem os meus surtos, amo vocês.

Ao meu orientador, Prof. Wandearley Dias, por toda a paciência, as palavras de conforto, ajuda e todo o conhecimento transmitido ao longo desses anos. A todos os membros do TIQNano, por todas as discussões e conhecimento adquirido durante as reuniões.

Aos meus amigos e amigas: Lavínia Malta, Miquéias Jacinto, Laís Alves, Mariana Monteiro, Yure Matheus e Sidna Roberta que estiveram presente ao meu lado durante a graduação, me ajudando a superar todos os obstáculos e me ajudando a continuar em frente. Sem vocês não teria conseguido chegar até aqui, obrigado por todo o carinho sempre serei eternamente grato.

A pessoa que mais me aguentou durante todo esse anos de graduação, pela imensa paciência que teve comigo durante esses anos, pelo carinho, por sempre me ajudar, por todos os conselhos, por todas as conversas, por sempre me apoiar muito mais do que eu merecia. Sou eternamente grato a você Michele Coêlho.

Agradeço a Deus por ter me dado força e saúde para conseguir até aqui e por possibilitar a existência de tantas pessoas importantes na minha vida.

Obrigado a todos por fazerem parte da minha vida !

RESUMO

A interação elétron-elétron é um elemento bastante importante nas propriedades de sistemas de baixa dimensionalidade. Entretanto, ela representa um desafio em sistemas de muitos corpos, visto que, o número de estados eletrônicos aumenta exponencialmente com o número de elétrons. Neste contexto, o modelo de duas partículas interagentes, se mostra atraente, uma vez que é capaz de resgatar aspectos relevantes presentes em sistemas de muitos corpos. Dentro desse contexto, nós investigaremos a influência da interação local e não-local na dinâmica de duas partículas interagentes na presença de um campo elétrico constante, a interação não é restrita apenas a dupla ocupação dos dois elétrons ao mesmo sítio, mas também aos seus vizinhos. Nosso modelo é descrito através de uma aproximação *tight-binding*, na qual a interação não-local surge ao considerarmos que a blindagem no potencial eletrônico é amortecida aos termos elétrons em sítios vizinhos. Assim, iniciamos nossos estudos por meio de uma abordagem numérica e analítica envolvendo caráter dinâmico e estático do sistema. Nossos estudos mostram que, para o sistema com apenas interação local, temos o surgimento de uma banda de estados ligados de natureza *on-site*. Já na presença de interação local e não-local, mostramos o surgimento de uma segunda banda de estados ligados. Além disso, vemos que a banda de estados ligados referente à interação *on-site* sofre um alargamento em relação ao caso sem interação não-local. Mostramos que tal comportamento está em concordância com estudos analíticos e numéricos estabelecidos na literatura. Ao investigarmos a dinâmica eletrônica na presença de um campo elétrico constante, revisitamos o fenômeno de dobramento da frequência das oscilações de Bloch, em que a interação *on-site* se mostra capaz de induzir o movimento coerente dos elétrons. Nossos resultados mostram um comportamento análogo, mesmo na presença de interação não-local. Entretanto, a interação não-local favorece um *hopping* coerente em sítios vizinhos, diferente do *hopping* coerente ocupando o mesmo sítio induzido pela interação local. Ambos são responsáveis por induzirem oscilações de Bloch com frequência dobrada. Mas observamos a existência de efeitos competitivos entre as bandas de estados ligados e não-ligados, que interferem numa dinâmica coerente das oscilações de Bloch. Nossos resultados apresentam os regimes mais propícios para observação do dobramento da frequência nestas oscilações.

Palavras-chave: Elétrons interagentes, Interação local, Interação não-local, Oscilações de Bloch.

ABSTRACT

The electron-electron interaction is a very important element in the properties of low-dimensional systems. However, it poses a challenge in many-body systems, as the number of electronic states increases exponentially with the number of electrons. In this context, the model of two interacting particles proves to be attractive, since it is capable of rescuing relevant aspects present in many-body systems. In this context, we will investigate the influence of local and non-local interactions on the dynamics of two interacting particles in the presence of a constant electric field, the interaction is not only restricted to the double occupation of the two electrons at the same site, but also at its neighbors. Our model is described through a *tight-binding* approximation, in which the non-local interaction arises when we consider that the shielding in the electronic potential is dampened by having electrons at neighboring sites. Thus, we started our studies through a numerical and analytical approach involving dynamic and static character of the system. Our studies show that, for the system with only local interaction, we have the emergence of a band of bound states of *on-site* nature. In the presence of local and non-local interaction, we show the emergence of a second band of bound states. Furthermore, we see that the bound state band referring to the *on-site* interaction undergoes a widening in relation to the case without non-local interaction. We show that such behavior is in agreement with analytical and numerical studies established in the literature. When investigating electronic dynamics in the presence of a constant electric field, we revisit the phenomenon of frequency doubling of Bloch oscillations, in which the *on-site* interaction is able to induce the coherent movement of electrons. Our results show an analogous behavior, even in the presence of non-local interaction. However, the non-local interaction favors a coherent *hopping* in neighboring sites, different from the coherent *hopping* occupying the same site induced by the local interaction. Both are responsible for inducing Bloch oscillations frequency doubling. But we observed the existence of competitive effects between the bound and unbound state bands, which interfere in a dynamics compatible with the Bloch oscillations. Our results present the most favorable regimes to observe the frequency doubling in these oscillations.

Keywords: Interacting electrons, On-site interaction, Nearest-neighbour interaction, Bloch Oscillations.

Lista de Figuras

2.1	Ilustração do padrão típico de um potencial cristalino.	9
2.2	Energia em função do vetor de onda, curva vermelha representa a energia para os elétrons de Bloch e a azul para os elétrons livres.	11
2.3	Densidade de estados para um rede cristalina com $N = 1000$	12
2.4	a) Função participação para $N = 250, 500, 1000$ e 2000 . b) Função participação reescalado com o tamanho da cadeia.	13
2.5	Dinâmica de um elétron (representando pelo ponto vermelho) sob ação de um campo elétrico constante. (a) Energia em função de $\vec{k}a$. (b) Velocidade em função de $\vec{k}a$	16
2.6	(a-b) Centroide da função de onda em função do tempo. (c-d) Transformada de Fourier do centroide. Considerando $N = 200$ e para $F = 0, 50$ e $0, 75$	18
2.7	Representação gráfica da densidade de estados para modelo de elétrons não interagentes para um sistema (a) isolante e (b) condutor. (c) Densidade de estados para o modelo de elétrons fracamente interagentes.	19
3.1	(a-c) Densidade de estados para $U = 0, 4, 6$ e $N = 115$ de dois elétrons interagentes em um rede cristalina. (d-f) Distância entre os dois elétrons para $U = 0, 4, 6$	26
3.2	(a) Extensão espacial e (b) função participação para um rede com $N = 1500$ para diferentes valores de interação até um tempo $t = 600$ e $\Delta t = 0.01$	28
3.3	Amplitude de probabilidade de dois elétrons com interação local no plano $n_{\uparrow} \times n_{\downarrow}$, para um rede com $N = 200$, $\Delta t = 2^{-4}$, l_0 e $U = 0, 2$ e 6	29
3.4	Função de onda eletrônica após um longo tempo de evolução com uma cadeia de $N = 1000$ e $U = 0, 4, 12$ e (a) $t = 5$, (b) $t = 20$, (c) $t = 40$ e (d) $t = 100$	30
3.5	Centroide da função de onda para um campo $F = 0.50$ e $F = 0.75$ para $U = 0$ e 4 ao lado suas respectivas transformadas de Fourier. Consideramos uma rede com $N = 120$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	31

3.6	Centroide da função de onda para um campo $F = 0.50$ para $U = 0, 4, 10$ e 14 ao lado suas respectivas transformadas de Fourier. Consideramos uma rede com $N = 120$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	32
4.1	Densidade de Estados para um rede com $N = 115$ com diferentes de interação, onde a curva azul claro é o caso sem interação não-local e a preta com interação não-local ($V = U/3$).	34
4.2	Correlação para um rede com $N = 115$ para diferentes valores de interação local, U , e não-local, ($V = U/3$), no qual as figuras azul representa a rede sem interação não-local e a vermelha com interação não-local.	35
4.3	Amplitude de probabilidade de dois elétrons com interação local no plano $n_\uparrow \times n_\downarrow$, para um rede com $N = 200$, $\Delta t = 2^{-4}$, l_0 e $U = 0, 2$ e 6	36
4.4	Centroide da função de onda na presença de interação local e não-local, para diferentes valores de interação. Na coluna esquerda temos o caso sem interação não-local, $V = 0$, na direita temos interação não-local $V = U/3$. A campo aplicado foi $F = 0.5$ e 0.75 com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	38
4.5	Transforma de Fourier do centroide da função de onda para uma rede $N = 200$, para diferentes valores de interação com $V = U/3$, campo $F = 0.5$ e 0.75 e $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	39
4.6	Media das probabilidades de dupla ocupação, ocupação de primeiros vizinhos e segundos vizinhos, com interação não-local ($V = U/3$) e sem ($V = 0$) em um função da interação, U , para um tempo suficientemente longo, com $N = 200$, $F = 0.5$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$	40

Sumário

1	Introdução	5
2	Fundamentação teórica	7
2.1	Modelo de Bloch	8
2.1.1	Teorema de Bloch	9
2.1.2	Caso Unidimensional	10
2.2	Presença do Campo Elétrico	14
2.3	Modelo de Mott e Hubbard	19
2.4	Modelo de Dois Elétrons interagentes	20
3	Sistemas com Elétrons Interagentes	22
3.1	Caso Cristalino	25
3.2	Caso Cristalino com Campo Elétrico	29
4	Oscilações de Bloch para Elétrons com Interação local e não-local	33
4.1	Caso Cristalino	33
4.2	Caso Cristalino com Campo Elétrico	37
5	Conclusão	41
	Referências	50
	Apêndices	51
A	Demonstração do Teorema de Bloch	51
B	Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Bloch	53
C	Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Hubbard	55

D Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Hubbard Estendido	58
E Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Hubbard Estendido	60
F Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Hubbard com Campo Elétrico	63
G Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Hubbard Estendido com Campo Elétrico	66

Capítulo 1

Introdução

As propriedades de transporte de cargas em sólidos têm sido estudadas ao longo de décadas. O primeiro modelo proposto para explicar o transporte de cargas em metais foi apresentado por Drude, que analisou o gás de elétrons livres de um ponto de vista puramente clássico[4, 77]. Apesar de suas falhas, seu modelo foi fundamental para o desenvolvimento de modelos futuros.

O modelo de Drude foi responsável por explicar a lei de Wiedemann e Franz. Ele prevê corretamente que, a densidade de corrente no metal é $\vec{J} = \sigma \vec{E}$. Entretanto, o modelo apresentava algumas falhas, como a previsão do calor específico. A partir do modelo de Drude, Sommerfeld, propôs uma reformulação do modelo, na qual a principal diferença foi a utilização da estatística de Fermi-Dirac. Através desse modelo foi possível explicar aspectos que não eram contemplados pelo modelo de Drude, como uma previsão correta para o calor específico. Entretanto o modelo apresentava algumas falhas, como por exemplo, o coeficiente Hall que não estava de acordo com o apresentado em estudos experimentais, também, deixando em aberto questões substanciais como a explicação da distinção em o caráter isolante e metálicos dos materiais. Então, com o advento da mecânica quântica, Felix Bloch foi responsável por propor o primeiro modelo de condução puramente quântico[6]. O modelo de Bloch, apesar de simples, foi de grande importância para compreender fatores importantes, como a teoria de bandas. Ele também proporcionou a explicação da distinção entre materiais condutores, semicondutores e isolantes, proposta inicialmente por Wilson[93]. Todavia, apesar da grande importância do modelo no entendimento de vários fenômenos físicos, sabe-se que a adição de novos ingredientes podem alterar o comportamento da função de onda, isto é, o sistema pode apresentar novas características que não eram possíveis de serem vistas no modelo de Bloch. Na ausência de um campo elétrico, por exemplo, temos que a função de onda apresenta uma caráter estendido na rede. Com a presença do campo elétrico aplicado externamente, Bloch propôs a existência de um comportamento oscilatório da função de onda eletrônica.

Experimentalmente as oscilações de Bloch foi observadas após o surgimento das super-redes semicondutoras [19, 29, 48, 88]. Com o avanço científico e tecnológica, podemos observar tais oscilações em super-redes eletrostáticas de grafeno/h-BN[25], como também em análogos acústicos[58] e ópticos[12, 70, 71]. Demais aplicações podem ser vistas em [12, 36, 49, 50, 52, 60, 70, 71].

Nesse contexto, há também estudos que considera a existência de interação de interação entre as partículas[68], elemento ausente no modelo de Bloch. Este estudo comprova experimentalmente a existência do dobramento da frequência das oscilações de Bloch[22], fenômeno proposto teoricamente que relata a possibilidade do *hopping* coerente das partículas alterar a frequência de oscilações. Esta fenomenologia foi também investigada experimentalmente usando um sistema análogo óptico[16, 59], que apresenta resultados consistentes com a proposta original.

Diante deste cenário, decidimos investigar os elétrons possuindo além da interação local (*on-site*), também uma interação quando os elétrons estão em sítios vizinhos. Este regime é compatível com o modelo Hubbard estendido, presente nas referências [38, 72, 82]. Assim, para melhor compreensão do nosso modelo e resultados, organizamos o texto da seguinte forma.

No capítulo 2, apresentamos uma descrição dos primeiros modelo de condução, no qual mostramos as falhas e acertos, suas importâncias e como eles foram modificados. Em seguida apresentaremos o modelo de Bloch, reproduzindo numericamente e analiticamente alguns resultados importantes. Logo em seguida, buscamos compreender o efeito do campo elétrico em um rede periódica cristalina, no qual iremos observar as oscilações de Bloch, tanto analiticamente quanto numericamente. Em seguida, veremos a interação entre os elétrons, apresentado inicialmente por Mott, onde apresentaremos o comportamento isolante de alguns materiais que não estavam de acordo com a teoria de Bandas, explicaremos a *transição de Mott* e o modelo de duas partículas interagentes.

O capítulo 3, nos dedicamos a apresentar o formalismo analítico e numérico para o modelo de dois elétrons interagentes em um rede cristalina. Apresentaremos os resultados relacionados a dois elétrons interagentes do ponto de vista estático e dinâmico, reproduzindo resultados existentes na literatura e validando assim os nosso códigos computacionais. Em seguida, adicionaremos a presença de um campo elétrico constante, aplicado paralelamente ao sentido da rede. Além de encontrar a relação de recorrência, resolvemos numericamente o conjunto de equações e discutimos resultados conhecido na literatura.

Já no capítulo 4, apresentaremos nosso modelo, que contempla um cenário com interação *on-site* e de primeiros vizinhos. Analisaremos primeiramente o efeito da interação entre primeiros vizinhos na ausência de um campo elétrico externo. Então, entendido o efeito desse novo elemento, adicionaremos a presença do campo elétrico e analisaremos os resultados obtidos. Por fim, no quinto capítulo apresentaremos as conclusões de todo o trabalho.

Capítulo 2

Fundamentação teórica

Após a descoberta do elétron, por J.J. Thomson em 1897, surgiram teorias que propuseram a descrição do comportamento dos elétrons em metais. Uma das primeiras teorias foi proposta por Drude [26, 27], onde ele apresenta um modelo de condução elétrica e térmica, aplicando apenas a teoria cinética dos gases em metais, considerando o sistema como um gás de elétrons.

A teoria cinética dos gases trata as partículas do gás como esferas sólidas idênticas, que movem-se em movimento retilíneo. Esse movimento é alterado somente quando há a colisão entre essas partículas. Para um metal ser eletricamente neutro, sabemos que devem haver pelo menos dois tipos de partículas, são elas os elétrons carregados negativamente e as cargas positivas, que podemos enxergá-las como cargas compensadoras, neste cenário. Além disso, para as partículas com uma massa muito maior que a do elétron, elas são consideradas imóveis.

Nesse contexto, o modelo de Drude pode ser visto da seguinte forma: Em um metal, os elétrons nas camadas mais energéticas são livres para percorrer o metal. Contudo, as partículas mais “pesadas”, os íons, são fixos. Para a análise de seu modelo Drude, tomou algumas hipóteses. Dentre elas, ele considerou que as colisões, tanto dos elétrons entre si quanto as dos elétrons com os íons, são desprezadas. Isso leva à *aproximação de elétrons independentes* (quando a interação elétron-elétron é desconsiderada) e à *aproximação de elétrons livres* (quando a interação elétron-íon é desconsiderada).

Apesar deste modelo ser simples e ser tratado em um ponto de vista puramente clássico, utilizando a estatística de Maxwell-Boltzmann, o modelo de Drude foi capaz de explicar a lei de Wiedemann e Franz, esta diz que a razão entre a condutividade térmica e elétrica é diretamente proporcional a temperatura [92]. O modelo também foi responsável por prever corretamente que, quando o sistema está sob a ação de um campo elétrico \vec{E} , a densidade de corrente no metal é $\vec{J} = \sigma \vec{E}$. Entretanto, como era de se esperar, uma análise puramente clássica trouxe alguns problemas, entre eles, uma previsão errada para o calor específico [4, 77].

Para Drude era razoável, pensar na distribuição de velocidade eletrônica era dada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. Essa distribuição nos dá o número de elétrons por

unidade de volume com uma velocidade $d\vec{v}$ em torno de \vec{v} , onde

$$f_B(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}, \quad (2.1)$$

com $n = N/V$, que é a densidade de um gás clássico em equilíbrio à uma temperatura T .

Nesse contexto, Arnold Sommerfeld, em 1927, com o advento da mecânica quântica, propôs uma reformulação do modelo de Drude [75]. Ele substituiu a estatística de Maxwell-Boltzman, pela estatística de Fermi-Dirac. Para justificar o uso da estatística de Fermi-Dirac, Sommerfeld, analisou a teoria quântica do gás de elétrons. Dessa forma, considerando agora o princípio da exclusão de Pauli, obtém-se

$$f(\vec{v}) = \frac{(m/\hbar)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp\left\{\left(\frac{mv^2}{2} - k_B T_0\right)/k_B T\right\} + 1}. \quad (2.2)$$

As equações 2.1 e 2.2 diferem significativamente para certos regimes de temperatura. De modo geral, o modelo de Sommerfeld é o modelo clássico de Drude, com a modificação da distribuição de velocidade eletrônica que foi substituída pela distribuição quântica de Fermi-Dirac. O modelo, ainda era um gás de elétrons livres e independentes.

Com essa simples modificação, o modelo de Sommerfeld foi capaz de explicar alguns resultados que não estavam de acordo com o modelo de Drude e foi capaz de fornecer um resultado mais coerente para o calor específico. Contudo alguns resultados observados experimentalmente não estavam de acordo com os apresentados nesse modelo, como é o caso do coeficiente Hall, que apresenta teoricamente um valor constante, mas os experimentos mostraram uma dependência do campo magnético com a temperatura. Além disso o modelo não era capaz de explicar questões fundamentais, como a distinção entre o caráter condutores e isolantes dos materiais.

Diante dessas previsões, mais uma vez se faz necessário uma reformulação do modelo de condução. Um dos principais pontos investigados foi a *aproximação de elétrons livres*, na qual os íons da rede são distribuídos aleatoriamente. Entretanto, com o advento do raio X, foi possível avançar na cristalografia. Com isso, veio a comprovação de várias previsões teóricas sobre o espaçamento atômico médio, denominado também de parâmetro de rede. Assim os íons são distribuídos em uma estrutura regular chamada de rede.

Portanto, abandonando completamente a aproximação de elétrons livres, F. Bloch foi responsável por propor o primeiro modelo de condução que incorpora a organização periódica dos íons e leva em conta a influência dos íons sobre os elétrons [6].

2.1 Modelo de Bloch

O modelo de Bloch foi capaz de solucionar questões deixadas pelos modelos de Drude e Sommerfeld, considerando a periodicidade da rede. Além disso, ele propõe uma explicação para o comportamento isolante e condutor de alguns materiais, através da teoria de banda, como veremos a seguir.

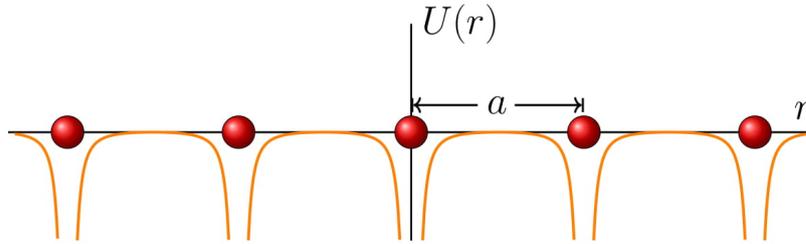
2.1.1 Teorema de Bloch

Como visto na seção anterior, o modelo de Bloch foi o primeiro modelo de condução a levar em consideração essa organização periódica dos íons. Nele é desconsiderado *aproximação de elétrons livres*. Nesse âmbito, os “*elétrons de Bloch*” interagem apenas com os íons da rede, representado por um potencial $U(\vec{r})$. Dessa forma, Bloch considerou uma estrutura periódica de uma rede cristalina e levou em conta as interações com os íons da rede por meio de um potencial periódico: os íons da rede são organizados periodicamente (ocupam posições fixas e estão igualmente espaçados), então os elétrons estará sob a ação de um potencial que possui a periodicidade da rede de Bravais¹ \vec{a} ,

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{a}). \quad (2.3)$$

Esse potencial é ilustrado na figura 2.1:

Figura 2.1: Ilustração do padrão típico de um potencial cristalino.



Fonte : Autor, 2020.

Para obtemos as propriedades do modelo de um elétron, devemos resolver a equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi = E\psi. \quad (2.4)$$

Devido a periodicidade da rede, encontramos que a solução da função de onda tem a forma (demostrada no apêndice A)

$$\psi_{n,\vec{k}}(r) = e^{i\vec{k}\cdot r} u_{n,\vec{k}}(r), \quad (2.5)$$

onde $u_k(\vec{r})$ contem a periodicidade da rede, isto é, $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{a})$. Esta equação é conhecida comumente como teorema de Bloch. Outra forma de escrever esse equação é através do fato de que $u_k(\vec{r})$ contem a periodicidade da rede, onde obtemos

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.6)$$

¹Uma rede de Bravais é um conjunto discreto de vetores não coplanares fechado sob as operações de adição e subtração vetorial, de tal forma que a soma ou diferença de dois vetores pertencentes ao conjuntos, continue dando um vetor pertencente ao conjunto.

Sob a representação da equação 2.5, o teorema de Bloch é representado por uma função de onda plana com um vetor de onda \vec{k} modulado em amplitude pela periodicidade da rede, fazendo com que a função de onda eletrônica se estenda por toda a rede. Assim, vemos aspectos de um comportamento metálico, que é uma das consequências mais importante do modelo de Bloch (entraremos em mais detalhes nas próximas seções). O vetor de onda \vec{k} presente na equação 2.5 sempre pode ser restrito a primeira zona de Brillouin, já que qualquer vetor \vec{k}' , que não pertence a primeira zona de Brillouin, pode ser escrito como

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}, \quad (2.7)$$

sendo \vec{K} um vetor da rede recíproca, ou seja, $e^{i\vec{K}\cdot\vec{a}} = 1$, para qualquer vetor da rede recíproca. Se o teorema de Bloch(2.5) vale para \vec{k}' ele valera também para \vec{k} . Como o conjunto de todas as funções e níveis de energia para dois valores de \vec{k} diferindo por um vetor da rede recíproca deve ser idêntico, podemos atribuir os índices n aos níveis, tal que para um dado n , os autoestados e os autosvalores são funções periódicas de \vec{k} na rede recíproca:

$$\psi_{n,\vec{k}+\vec{K}}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.8)$$

$$\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{K}) = \varepsilon_n(\vec{k}). \quad (2.9)$$

Isso leva a descrição dos níveis de energias de um elétron num potencial periódico em termos de uma família de funções contínuas, $\varepsilon_n(\vec{k})$, cada uma contendo a periodicidade da rede recíproca. Essas funções nos dão a informação referidas a *estrutura de banda*. Para cada índice n , o conjunto de níveis de eletrônicos especificado por $\varepsilon_n(\vec{k})$ são denominados de *banda de energia*.

O estado fundamental de N elétrons é construído de modo que os números quânticos n e k representam os níveis de um elétron, onde k deve estar confinado em uma única célula primitiva da rede recíproca, contando cada nível apenas uma vez. Conforme os níveis mais baixos de energia são preenchidos com uma dada quantidade de elétrons, temos duas configurações possíveis: Na primeira, temos a ultima banda completamente cheia, na qual a diferença entre o maior nível de energia ocupado e o menor desocupado denominado de *gap* de energia(ou energia proibida) de energia; Na segunda, temos a ultima banda pode estar parcialmente preenchida.

A partir dessa descrição o modelo de Bloch foi capaz de explicar a diferença entre condutores, isolantes e semicondutores, que não era explicada através do modelo de Sommerferld. Essa descrição é uma das importantes consequências do modelo de Bloch, proposta inicialmente por A. H. Wilson [93]. A diferença fundamental aparece devido ao surgimento de bandas de energia proibidas relacionadas com a estrutura periódica do cristal.

2.1.2 Caso Unidimensional

Além dos estudos analíticos, faremos também uma análise numérica dos sistemas apresentados. Para uma primeira investigação, por simplicidade, consideraremos o caso unidimensional de um elétron em uma rede cristalina. Inicialmente podemos imaginar que

os íons da rede possuem um orbital n , que os elétrons podem ocupar. Os elétrons que ocupam o íon n possuirão uma energia ε_n , que está intimamente ligada com a energia potencial do íon ocupado. Utilizando a aproximação *tight-binding*, assumimos que há uma superposição dos orbitais, de tal forma que a partícula só pode interagir com as orbitas dos primeiros vizinhos, onde esse energia cinética para o elétrons ir para os vizinhos é $J_{n,n\pm 1}$. Neste cenário a hamiltoniana do modelo pode ser escrita como,

$$H = \varepsilon \sum_n |n\rangle\langle n| - J \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|), \quad (2.10)$$

sendo, ε a energia de acoplamento do elétron ao sítio n ou energia *on-site*; J o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos. Como a rede é cristalina, ε e J são constantes ao longo da rede.

Na intenção de entender o comportamento dos auto-estados, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo,

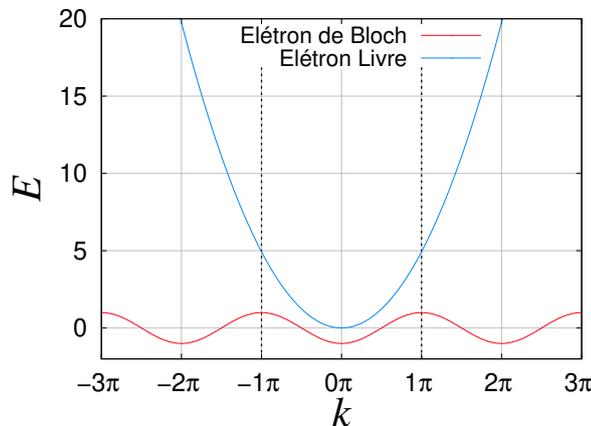
$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (2.11)$$

para a hamiltoniana 2.10. Após tratamento analítico, como mostrado no apêndice B, obtemos a seguinte expressão para os valores das auto-energia

$$E = \varepsilon - 2J\cos(ka), \quad (2.12)$$

sendo a o vetor unitário da rede. A partir da equação acima podemos ver que as energias de Bloch, no espaço k , são periódicas e a energia esta dentro do intervalo, $\varepsilon - 2J\cos(ka) < E < \varepsilon + 2J\cos(ka)$. Com isso, os valores de energia para o elétron de Bloch estão contidos em $[-\pi a, \pi a]$, e o vetor da rede recíproca² é $K = 2\pi/a$.

Figura 2.2: Energia em função do vetor de onda, curva vermelha representa a energia para os elétrons de Bloch e a azul para os elétrons livres.



Fonte : Autor, 2022.

²O conjunto de todos os vetores de onda \vec{K} para os quais as ondas planas terão a mesma periodicidade de uma rede de Bravais é conhecida como rede recíproca.

Ao compararmos a energia de Bloch com a de elétrons livres, mostrado na figura 2.2, considerando $J = \hbar = m = a = 1$ e $\varepsilon = 0$. Para o caso do elétrons livre (curva azul), sabemos que a energia é dada por $E = \vec{p}^2/2m$, com $\vec{p} \rightarrow \hbar k^2$. Observamos uma dependência quadrática com k , na qual as energias acessíveis aumentam a medida que k cresce. Deferentemente do caso do elétron livre, os elétrons de Bloch (curva vermelha), apresentam um comportamento periódico e todos os valores de energias estão contidos na primeira zona de Brillouin (ilustrada na figura pela linhas tracejadas) delimitada por $[-\pi, \pi]$ para $a = 1$.

Além disso, resolvemos numericamente a equação secular, $\det[H - \varepsilon I]$, utilizando a linguagem de programação FORTRAN e também as bibliotecas BLAS[46] e LAPACK[2]. A partir dos auto-estados calculamos as seguintes quantidades físicas: a densidade de estados normalizada,

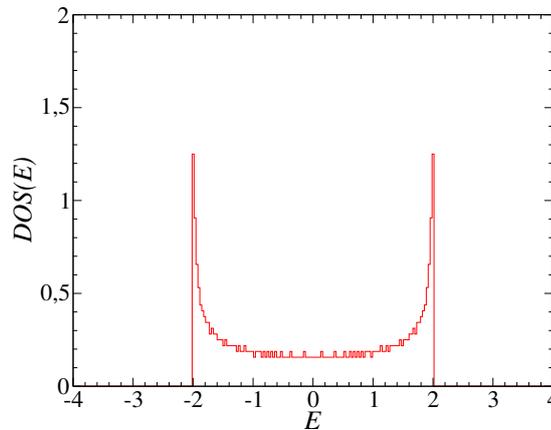
$$DOS(E) = \frac{1}{N} \sum_n \delta(E - E_n), \quad (2.13)$$

que é essencialmente o número de níveis dentro de um intervalo $E + dE$ que o elétron pode ocupar, N é o tamanho da cadeia. Também computamos a função participação [45, 89],

$$P = \frac{\sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^4} \quad (2.14)$$

que nos dá ideia da região do espaço onde a amplitude da função de onde difere significativamente de zero. Para entendermos melhor essa medida do grau de localização, consideraremos que os estados estão normalizados, isto é, $\sum_n |c_n|^2 = 1$. Em uma rede cristalina, teremos que os estados são estendidos, logo as amplitudes de probabilidade são $|c_n|^2 = N^{-1}$. Portanto a função participação é proporcional ao tamanho da cadeia, já que $P = N^{-1}/N^{-2} = N$.

Figura 2.3: Densidade de estados para um rede cristalina com $N = 1000$.



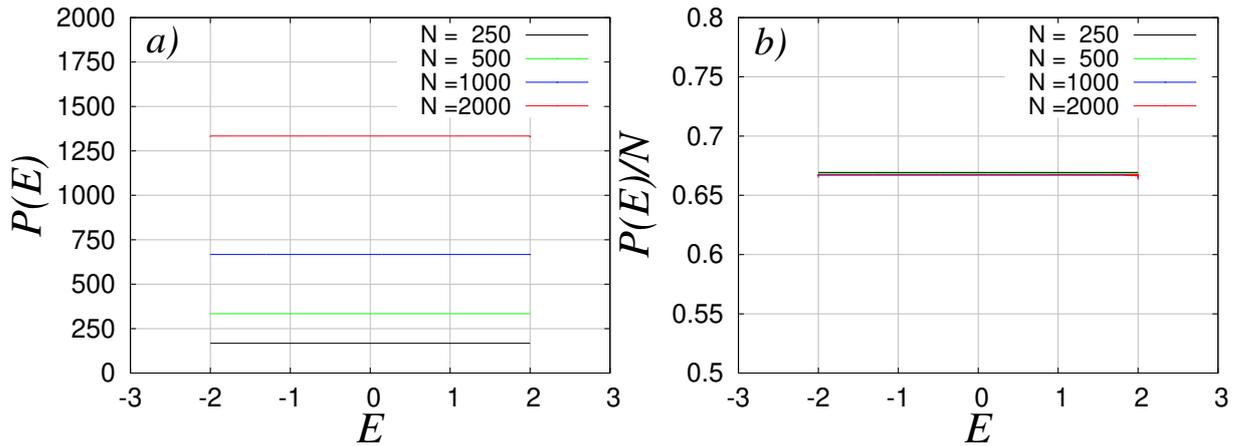
Fonte : Autor, 2022.

Na figura 2.3, temos a densidade de estados para uma cadeia de tamanho $N = 1000$, com $\varepsilon = 0$ e $J = 1$. A energia esta distribuída de forma simétrica, de tal forma que

temos o maior número de estados que as partículas ocupam nas extremidades da rede, caracterizando a singularidade de *Van Hove*³. Com isso temos, que a função de onde assume maior número de estados extremos da banda, sugerindo que a função de onda se estende pela rede.

Na figura 2.4, temos a função participação em função da energia para uma rede cristalina de tamanhos 250, 500, 1000 e 2000. Inicialmente, figura 2.4(a), observamos que a participação dos atesteados são todas iguais no sistema e a medida que aumentamos o tamanho da rede, a participação aumenta. É visto também que as energias estão restritas ao intervalo $[-2, 2]$, como mostrado no apêndice B. Como vimos, para estados estendidos temos que, a função participação é proporcional ao tamanho da rede. Podemos observar esse comportamento na figura 2.4(b), dessa forma temos que o sistema é governado por estados estendidos. Além disso, nota-se que na figura 2.4(b), que função participação colapsa aproximadamente em 0.66. Esse resultado é esperado, uma vez que as amplitudes de probabilidades da função de onda estacionária são diretamente proporcionais a $\cos(kr)$.

Figura 2.4: a) Função participação para $N = 250, 500, 1000$ e 2000 . b) Função participação reescalado com o tamanho da cadeia.



Fonte : Autor, 2022.

Podemos verificar isso, considerado, por simplicidade que $\phi_n = \cos(x) = \phi(x)$ (uma vez que as amplitudes das ondas estacionárias são proporcionais a $\cos(kr)$). Então reescrevendo a função participação na forma integral, temos

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{[\int_0^N |\phi(x)|^2 dx]^2}{\int_0^N |\phi(x)|^4 dx} = \left[\frac{\sin(2N) + 2N}{4} \right]^2 \left[\frac{\sin(4N) + 8\sin(2N) + 12N}{32} \right]^{-1}, \\
 &= \frac{32}{16} [\sin(2N) + 2N]^2 [\sin(4N) + 8\sin(2N) + 12N]^{-1}. \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

Tomando agora o limite termodinâmico, temos

$$P = \lim_{N \rightarrow \infty} = \frac{32}{16} \left\{ N \left[\frac{\sin(2N)}{N} + 2 \right] \right\}^2 \left\{ N \left[\frac{\sin(4N)}{N} + \frac{8\sin(2N)}{N} + 12 \right] \right\}^{-1},$$

³Uma singularidade de van Hove é basicamente um ponto não suave na densidade de estados (DOS) de um sólido cristalino.

$$= 2 \cdot N \cdot 4 \cdot \frac{1}{12} = \frac{2N}{3}, \quad (2.16)$$

corroborando p resultado numérico e também a literatura[79].

O modelo de Bloch apesar de simples, foi de grande importância para compreender fatores importantes e como vimos, ao considerar a interação do elétron com o íon foi possível caracterizar o material como perfeitamente cristalino. Também, através dele, surgiu a explicação da distinção entre materiais condutores e isolantes. Outra característica importante apresentada por Bloch, aparece ao consideramos que os elétrons estão sujeito a um campo elétrico constante. Nesse cenário, o elétron realiza oscilações coerentes com frequência proporcional ao campo aplicado, essas oscilações são conhecidas como *oscilações de Bloch*[4, 77], com veremos a seguir.

2.2 Presença do Campo Elétrico

Na teoria do elétron livre, quando o elétron esta sob a ação de um campo elétrico constante \vec{F} , o movimento dele passa a ser uniformemente acelerado na direção dada pelo força de Lorentz, $\vec{\mathcal{F}} = -e\vec{F}$. Contudo, devido ao potencial periódico, o elétron de Bloch irá realizar oscilações coerentes com frequência proporcional ao do campo aplicado, conhecidas na literatura como oscilações de Bloch[4, 6, 28, 84, 85, 86, 87].

Explicaremos esse fenômeno por meio de uma abordagem semi-clássica, isto é, iremos determinar as equações do movimento para cada elétrons na presença de um campo elétrico externo através do formalismo de Hamilton, em seguida quantizaremos o momento do elétron fazendo $\vec{p} \rightarrow \hbar\vec{k}$.

Dessa forma a hamiltoniana do sistema será escrita como,

$$H = E_l(\vec{k}) + V(\vec{r}), \quad (2.17)$$

com $E_l(\vec{k})$ sendo a energia de cada elétron. Lembrando que as equações de Hamilton são,

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad e \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{r}}, \quad (2.18)$$

a partir da primeira equação, obtemos

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dH}{d\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_l}{d\vec{k}}. \quad (2.19)$$

A equação 2.19 nos dá a velocidade de grupo (velocidade do pacote de onda). Resolvendo, agora a segunda equação de 2.18, temos

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}}[E_l(\vec{k}) + V(\vec{k})],$$

$$\dot{\vec{p}} = \frac{\partial V}{\partial \vec{r}}, \quad (2.20)$$

uma vez que o campo elétrico é conservativo temos, $\vec{\nabla}V = -e\vec{F}$, então

$$\dot{\vec{p}} = -e\vec{F},$$

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = -e\vec{F}.$$

Integrando a equação a cima, obtemos

$$d\vec{k} = -\frac{1}{\hbar}e\vec{F}dt \quad \Rightarrow \quad \int_0^t d\vec{k} = -\frac{1}{\hbar}e\vec{F} \int_0^t dt \quad \Rightarrow \quad \vec{k}(t) - \vec{k}_0 = -\frac{1}{\hbar}e\vec{F}t,$$

logo

$$\vec{k}(t) = \vec{k}_0 - \frac{1}{\hbar}e\vec{F}t. \quad (2.21)$$

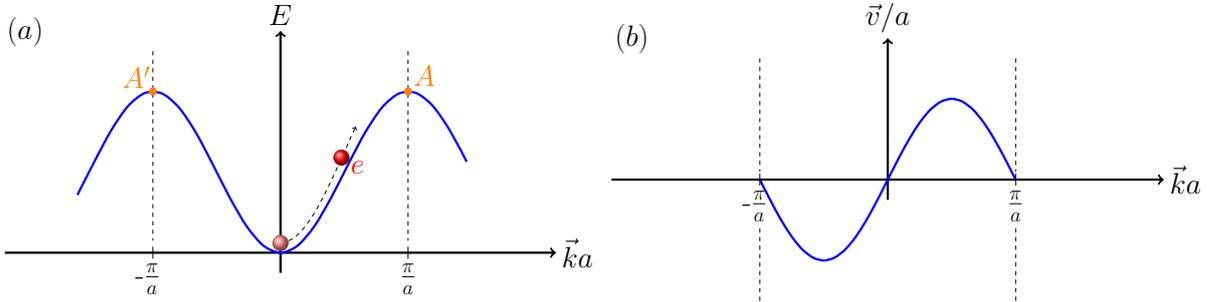
Com isso, vemos que o vetor de onda depende linearmente do tempo. Na intenção de obtemos uma distinção mais precisa do comportamento do elétron livre e o elétron em um potencial periódico, analisaremos a dependência da energia com o vetor de onda. Como já havíamos discutido no início do capítulo, para o elétron livre temos que a dependência da energia com o vetor de onda, \vec{k} , é quadrática. Entretanto, para o elétron no potencial cristalino, temos que a energia é periódica e delimitada pela primeira pelas zonas de Brillouin, obedecendo $E(k) = \varepsilon - 2J\cos(\vec{k}a)$. Além disso, por meio da equação 2.19, teremos

$$\vec{v}_g = 2aJ\sin(\vec{k}a), \quad (2.22)$$

onde \vec{k} é dado pela equação 2.21. Portanto, temos o comportamento de uma partícula em uma banda de energia. Na figura 2.5, onde consideramos $\hbar = J = 1$ e $\varepsilon = 2$, temos a energia e a velocidade encontrada em função de $\vec{k}a$.

Na figura 2.5(a), para o campo elétrico desligado, no estado $\vec{k} = \vec{k}_0 = 0$, teremos \vec{v}_g , ou seja, o elétron está parado. A medida que o campo elétrico se faz presente no sistema, o elétron partindo de $\vec{k} = 0$ percorre todos os estados na primeira metade da primeira zona de Brillouin, até o ponto A . O ponto A é igual ao ponto A' , entretanto eles são separados pelo vetor da rede recíproca $\vec{K} = (2\pi/a)\vec{k}$. Isso ocorre devido a periodicidade da rede. Dessa forma, quando o elétron ultrapassa o ponto A , o elétron entra em outra zona de Brillouin, porém como todas as zonas são iguais, o que acontece com o elétron nessa outra zona é equivalente a dizer que quando o elétron ultrapassa o ponto A ele reaparece no ponto A' . Tendo em mente o esquema de zona reduzida e a periodicidade da função $E_i(\vec{k})$, podemos, então, atribuir à mudança de sentido de \vec{k} com o tempo como sendo um processo periódico, no qual o elétron vai de A' até A , onde no instante que ele passa por A ele surge em A' , repetindo sempre esse ciclo, que pode ser interpretado como as reflexões

Figura 2.5: Dinâmica de um elétron (representando pelo ponto vermelho) sob ação de um campo elétrico constante. (a) Energia em função de $\vec{k}a$. (b) Velocidade em função de $\vec{k}a$.



Fonte : Autor, 2022.

de Bragg. Relacionado a este fenômeno, existe uma oscilação da velocidade, \vec{v}_g , no espaço real uma vez que esta muda periodicamente de sinal, como vemos na figura 2.5(b). Ao partimos de $\vec{k} = 0$, temos um aumento na velocidade do elétron até um máximo, a partir desse ponto a velocidade diminui até zerar, isto é, a velocidade diminui até o limite da zona. Com isso, o elétron retorna na outra extremidade da zona possuindo agora uma velocidade negativa, onde esse velocidade diminuí até o mínimo, após ele a velocidade começa a aumentar, de tal forma que esse processo se repeti.

Como o sistema agora apresenta oscilações, se faz necessário determinamos a frequência com que esta ocorre. Assim, assumiremos que o vetor de onda \vec{k} esteja inicialmente em A' , teremos

$$k(\vec{0}) = \vec{k}_0 = -\frac{\pi}{a}, \quad (2.23)$$

tomando t_{osc} , como sendo o tempo que o vetor \vec{k} leva para chegar em π/a , então da equação 2.21

$$\vec{k}(t_{osc}) = -\frac{e\vec{F}}{\hbar}t_{osc} + \vec{k}_0,$$

então como, $\Delta\vec{k} = 2\pi/a$, entre A' e A , teremos

$$\Delta\vec{k} = \vec{k}(t_{osc}) - \vec{k}_0 \Rightarrow \frac{2\pi}{a} = -\frac{e\vec{F}}{\hbar}t_{osc},$$

definindo t_{osc} como o período para ocorrer uma oscilação, τ , teremos

$$\tau = -\frac{2\pi\hbar}{eFa},$$

$$\frac{\tau}{2\pi} = -\frac{\hbar}{eFa},$$

$$\omega = -\frac{eFa}{\hbar}. \quad (2.24)$$

Assim, através de um tratamento semi-clássico conseguimos mostrar que a frequência de oscilação é diretamente proporcional ao campo elétrico aplicado. Além disso, podemos determinar a amplitude de oscilação da função de onda. Uma vez que $E_l(\vec{k}), \vec{r}$ e \vec{k} são contínuas em $[-\pi/a, \pi/a]$, teremos partindo de 2.19, que

$$\vec{r}(t) - \vec{r}_0 = \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_l(\vec{k})}{\partial \vec{k}} dt, \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_l(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \frac{\partial dt}{\partial \vec{k}} d\vec{k}, \\ &= -\frac{1}{-e\vec{F}} [E_l(\vec{k}(t)) - E_0(\vec{k}(0))], \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde $[E_l(\vec{k}(t)) - E_0(\vec{k}(0))]$ é definida como a largura de banda W . Assim a amplitude de oscilação é

$$\vec{r}_{max} = \frac{W}{e\vec{F}}, \quad (2.27)$$

sendo esta inversamente proporcional ao campo elétrico e diretamente a largura de banda.

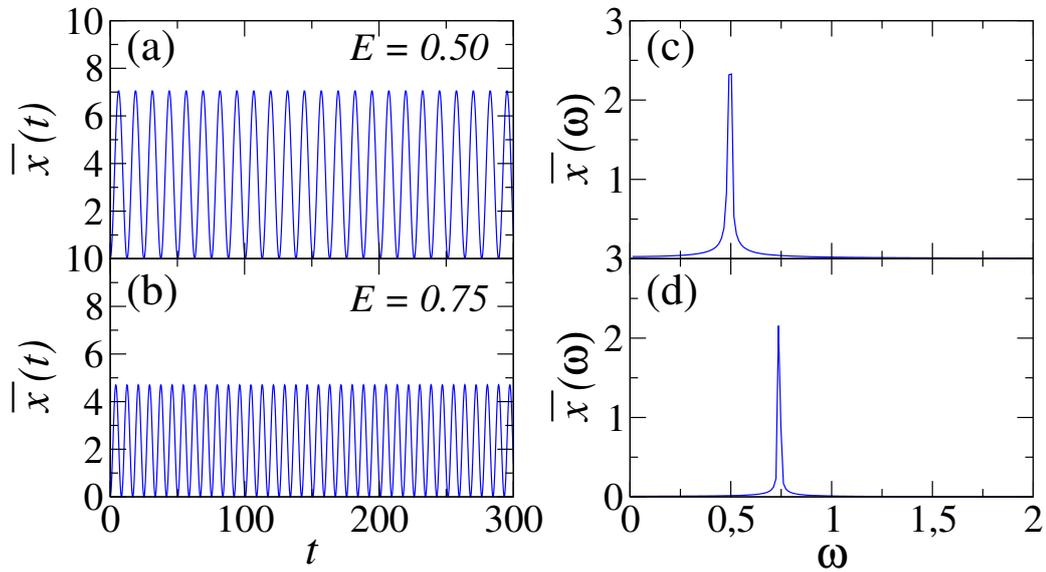
Portanto, em um sistema que temos a aplicação de um campo elétrico constante em uma rede com potencial periódico, o pacote de onda irá oscilar com uma frequência diretamente proporcional ao campo aplicado, e esse tipo de oscilação é denominada de *oscilação de Bloch*.

Na figura 2.6, podemos ver essas oscilações, no qual temos a simulação numérica para o sistema apresentado na equação 2.10, considerando agora a inclusão do campo elétrico, de um elétron em um rede cristalina na presença do campo elétrico. Calculamos o centroide da função de onda e a transformada de Fourier do centroide. Em 2.6(a), temos a posição media do pacote de onda com $F = 0.50$ aplicado paralelamente a rede, e ao tirarmos a transformada de fourier para este caso, figura 2.6(c), podemos ver que a frequência de oscilação do elétron corresponde ao valor do campo externo aplicado, como mostramos na equação 2.24. Já quando aplicamos um campo $F = 0.75$, observamos, também, o mesmo comportamento, figuras 2.6(b) e 2.6(d).

Inicialmente essas oscilações foram observadas experimentalmente em sistemas de super rede semi-condutoras[29, 47]. Além disso, apesar do modelo ser bastante simples, surgiram outras observações extremamente revelantes, como o resfriamento de átomos de Césio[5] e também em condensados de Bose-Einstein aprisionados em redes ópticas[37, 61]. Do ponto de vista teórico, esse modelo tem sido bastante investigado, como o caso para analisar a coexistência de desordem e campo elétrico[65, 74].

Investigações envolvendo interação entre elétrons interagentes sob a influência de um campo elétrico aplicado externamente, foi bastante estudado[9, 10, 13, 22, 68]. De modo geral, acreditava-se que a interação entre os elétrons destruía as oscilações de Bloch [31,

Figura 2.6: **(a-b)** Centroide da função de onda em função do tempo. **(c-d)** Transformada de Fourir do centroide. Considerando $N = 200$ e para $F = 0,50$ e $0,75$.



Fonte : Autor, 2022.

33]. No entanto, a referência [22] mostrou em seu modelo que a interação entre os elétrons da origem ao dobramento de frequência nas oscilações de Bloch. Alguns anos depois, o proposta foi apoiada por experimentos em átomos bosônicos ultrafrios[68], bem como em análogo óptico [16, 59].

O formalismo empregado pelos autores contemplam dois elétrons interagentes em uma rede unidimensional cristalina. Esta modelagem simplificada tem se mostrado capaz de resgatar aspectos físicos relevantes, presentes em sistemas de muitas partículas, como pode ser encontrado na literatura [1, 7, 51, 64].

O modelo de Bloch foi extremamente importante na descrição de diversos fenômenos físicos, como foi apresentado até o momento. Entretanto, alguns resultados experimentais não estavam de acordo com a teoria de bandas, isto é, materiais que deveriam ser comportar como condutores apresentavam característica de um isolante. Por exemplo, J.H. De Boer e E. J. W. Verwey[17] mostraram uma classe de elementos que deveriam apresentar um comportamento metálico, porém, foi observado experimentalmente um comportamento isolante.

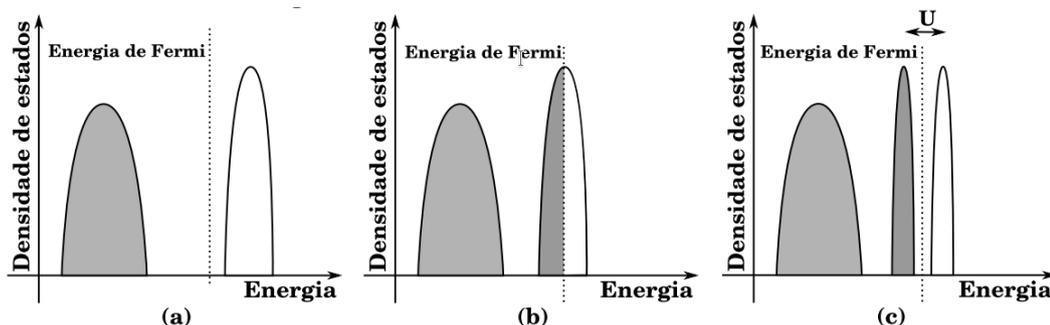
Dessa forma, esses resultados mostraram que a teoria de bandas estava incompleta. Uma explicação para o comportamento desses materiais foi proposta por *Mott*, no qual é considerado uma dos elementos ausente no modelo de Bloch, interação elétron-elétron. Na qual, ele atribuiu o comportamento isolante desse materiais a forte interação coulombiana quando os elétrons estão no mesmo sítio, abandonando agora a *aproximação de elétrons independentes*.

2.3 Modelo de Mott e Hubbard

Em 1937, Mott e Peierls apresentaram um dos primeiros trabalhos sobre interação elétron-elétron e propuseram que esta era responsável pelo caráter isolante em alguns óxidos de metais de transição[63]. A descrição para esse comportamento veio através do modelo proposto por Mott, em 1949[62], onde ele sugeriu que, a formação de um *gap* de energia impedindo a condução aparece devido a competição entre o termo de energia coulombiana, U , e do termo de energia cinética (*hopping*), entre os sítios vizinhos. Com isso ele mostrou que a interação é capaz de alterar as propriedades de transporte no material. Dessa forma, os materiais que apresentam o caráter isolante devido a interação foram denominados de *isolantes de Mott*.

Para entendermos de forma mais clara esse comportamento apresentado pelos *isolantes de Mott*, voltaremos a teoria de bandas, na qual, sabemos que a distinção entre isolante e condutor é feita através do preenchimento da sua estrutura eletrônica. Para o isolante, a banda de valência é totalmente preenchida, ver figura 2.7(a) e o condutor, apresentam uma banda parcialmente preenchida, ver figura 2.7(b).

Figura 2.7: Representação gráfica da densidade de estados para modelo de elétrons não interagentes para um sistema (a) isolante e (b) condutor. (c) Densidade de estados para o modelo de elétrons fracamente interagentes.



Fonte : W.S. Dias, 2011(referencia [23]).

Então, sob a visão de Mott, a interação entre os elétrons separam a banda parcialmente preenchida em duas sub-bandas, dessa forma o nível de Fermi ficara localizada em um gap de energia, o que resulta no caráter isolante do material, de tal forma que a energia de interação é o parâmetro que controla o comportamento do sistema, se é isolante ou metálico.

Assim podemos descrever o isolante de Mott, da seguinte forma : Considerando uma rede com poucos elétrons, na qual, queremos adicionar outro elétron a esta rede. Nesse cenário teremos que, a probabilidade desse novo elétron encontrar outro no mesmo sítio que ele é posto é pequena, então o nosso custo energético para adicionar o novo elétron é baixo e não envolve uma repulsão coulombiana. Agora, se a rede esta semi-preenchida, ou seja, um elétron por sítio da rede, o custo energético, agora, irar envolver um repulsão coulombiana, uma vez que provavelmente o novo elétron estará no mesmo sítio que outro e o custo de adicionar o elétron a esse sítio deve ser aumentado de U . Dando origem ao gap de Mott, ver figura 2.7(c). Assim, é razoável dizemos que quanto maior for o custo

de dupla ocupação, dada pela interação coulombiana U , mais a propagação do elétron é inibida, com isso o sistema apresenta um comportamento isolante. Essa transição metal-isolante dada pela interação entre os elétrons e denominada de *transição de Mott*[34].

A hamiltoniana que descreve a *transição de Mott*, foi proposta em 1964 por Hubbard [39, 40, 41], dada por

$$H = -t \sum_{i,j} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad (2.28)$$

onde podemos ver que o sistema é governado apenas por dois parâmetros, o termo de *hopping*, t , que corresponde a amplitude de probabilidade para o eletro saltar entre os sítios vizinhos e o termo de interação coulombiana, U , quando os elétrons estão no mesmo orbital, no qual os níveis de energia de cada estado ligado é reduzido a um único orbital.

O modelo proposto por Mott e Hubbard foi fundamental para explicação dos que não estavam de acordo com a teoria de bandas e foi corroborado por estudos experimentais[42, 44]. No entanto, apesar do modelo aparentar ser simples ele apresenta algumas dificuldades como, o termo de interação não ser suficientemente pequeno para ser tratado do ponto de vista da teoria da perturbação e também o esforço computacional é muito alto, uma vez que os estados eletrônicos aumenta exponencialmente com o número de partículas. Além disso soluções exatas para o modelo só são encontradas para o caso unidimensional[53, 54, 55, 94, 56].

2.4 Modelo de Dois Elétron interagentes

Como visto anteriormente, sistemas que apresentam interação entre elétrons mostram algumas dificuldades, fazendo-se necessário um modelo mais simplificado. Em 1994, Shelyansk estudou o modelo de dois elétrons interagentes em um rede desordenada⁴ [73] na intenção de compreender resultados da coexistência da interação entre elétrons e desordem em anéis mesoscópicos[1, 7, 51, 64].

O modelo proposto por Shelypansky apresenta o termo de interação *on-site* de Hubbard em um potencial desordenado. Em seu trabalho, ele mostrou que, para as partículas inicialmente distantes uma da outra, a influência da interação entre as partículas é muito pequena. Contudo, se a distância entre as partículas for próxima do comprimento de localização de uma partícula ξ_1 , há a possibilidade das partículas propagarem-se coerentemente por uma distância muito do que o comprimento de localização das duas partículas ξ_2 , enfraquecendo a localização de Anderson. Além disso, a relação entre os comprimentos de localização obedecem, a seguinte relação,

$$\xi_2 \propto U^2 \xi_1^2. \quad (2.29)$$

⁴A desordem, introduzida por P.W.[3] Anderson, pode ser interpretada como uma interferência destrutiva de ondas eletrônicas por conta do potencial aleatório, sendo esta responsável pela inibição do pacto de onda, caracterizando uma localização de Anderson.

Dessa forma, apesar de simples o modelo é capaz de resgatar aspectos físicos de sistemas que apresentam muitos partículas [1, 7, 51, 64], dando bastante relevância ao modelo proposto por Shelyansk.

Então, deu-se origem a um série de estudos relacionados ao modelo. Inicialmente os primeiros trabalhos foram dirigidos a confirmação do fenômeno observado por Shelyansk, em que a presença da interação enfraquecia a localização de Anderson [30, 43, 90]. Além disso, vários trabalhos surgiram relacionados a esse modelo [18, 83]. Todavia, trabalhos envolvendo sistemas de muitos corpos relacionados com interação elétron-elétron e desordem, verificaram uma dependência não monoatômica do enfraquecimento da localização [11, 32, 67].

Nos próximos capítulos, apresentaremos a modelagem de dois elétrons em uma rede unidimensional e alguns resultados presentes na literatura, como o surgimento de uma banda de estados ligados a medida que aumentamos a interação entre os elétrons, juntamente com a influência desta na dinâmica do sistema elétrons [15, 21, 24]. Apresentaremos também o dobramento da frequência das oscilações de Bloch [22]. Em maiores detalhes, ao término do próximo capítulo iremos entender melhor o tema central deste TCC — Influência da interação local e não-local na dinâmica de elétrons interagentes sob ação de um campo elétrico constante em uma rede cristalina unidimensional.

Capítulo 3

Sistemas com Elétrons Interagentes

Como visto na seção 2.3, o modelo de Mott e Hubbard apesar de ter sido extremamente importante apresenta algumas dificuldades. Dessa forma, o modelo de duas partículas interagentes apresentado por Shelpelyansk se faz bastante atraente, uma vez que, além de ser um modelo relativamente mais simples, é capaz de resgatar características de sistemas de muitos corpos.

Na intenção de entender e validar os nossos códigos computacionais, inicialmente iremos analisar o caso cristalino de dois elétrons com interação apenas local, já reportado na literatura [15, 21, 24, 66]. Assim, o nosso modelo é composto por N átomos idênticos espacialmente distribuídos em uma rede unidimensional, no qual cada íon possui um único orbital livre que pode ser ocupado por um ou dois elétrons. Quando temos a dupla ocupação dos elétrons no mesmo íon, temos o termo de interação coulombiana entre eles. Então, podemos escrever a hamiltoniana do sistema como

$$H = \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\downarrow} c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\downarrow}, \quad (3.1)$$

onde c e c^\dagger são os operadores aniquilação e criação, respectivamente, de um elétron com spin $s = \pm 1/2$ (representados por $\{\uparrow, \downarrow\}$) para o sítio n , J é o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos, ε é o termo de energia para o elétron acopla-se ao íon n e U é o termo de interação coulombiana quando os elétrons estão no mesmo sítio. Vale destacar que, como temos uma rede cristalina ε e J são constantes por toda a rede.

Dentro desse cenário, abordaremos os elétrons como sendo distinguíveis pelo spin, conforme reportado na literatura [8, 22, 69, 76]. Dessa modo, podemos escrever a parte espacial da função de onda como um produto das funções de onda de cada elétron $\varphi(\vec{r}_\uparrow, \vec{r}_\downarrow) = \varphi_\uparrow(\vec{r}_\uparrow)\varphi_\downarrow(\vec{r}_\downarrow)$. Todavia, expandiremos a função de onda na representação de Wannier¹, logo

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \quad (3.2)$$

onde n_\uparrow e n_\downarrow representa a posição do elétron com spin *up* e *down*, respectivamente [14,

¹As funções de Wannier são um conjunto de funções ortogonais para cada sítio em um cristal, com isso é extremamente conveniente usá-las para como base para a expansão de estados eletrônicos.

18]. Com isso, o sub-espaço é gerado por N^2 dunções de ondas, isto é, o espaço de *Hilbert*² possui dimensão N^2 .

Assim, para determinarmos a relação de recorrência do sistema, aplicamos operador H em ψ e temos

$$H|\psi\rangle = \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] |\psi\rangle + U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\downarrow} c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle,$$

escrevendo cado termo da equação acima isoladamente,

$$\begin{cases} H_1|\psi\rangle &= \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle, \\ H_2|\psi\rangle &= J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] |\psi\rangle, \\ H_3|\psi\rangle &= U \sum_{n=1}^N c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\downarrow} c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\downarrow} |\psi\rangle. \end{cases}$$

Dessa maneira, H_1 assume a forma,

$$\begin{aligned} H_1|\psi\rangle &= \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle \\ &= \varepsilon \sum_{n=1}^N [c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow}] \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\ &= \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\ &= \varepsilon \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (|n_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle), \\ &= 2\varepsilon \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Para H_2

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

²O espaço de Hilbert para um sistemas de N_e partículas interagentes possui dimensão N^{N_e} .

Por fim, para H_3

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

Então como escrevermos $H|\psi\rangle = H_1|\psi\rangle + H_2|\psi\rangle + H_3|\psi\rangle$, temos que

$$\begin{aligned}
H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (2\varepsilon + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J[|(n+1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |(n-1)\uparrow, n\downarrow\rangle \\
&\quad + |n\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle].
\end{aligned}$$

Assim, o valor esperado, $\langle\psi|H|\psi\rangle$, será

$$\begin{aligned}
\langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | [(2\varepsilon + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle + J(|(n+1)\uparrow, n\downarrow\rangle \\
&\quad + |(n-1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle)]
\end{aligned}$$

tal que obtemos,

$$\begin{aligned}
\langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* [(2\varepsilon + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} + J(\phi_{(n+1)\uparrow, n\downarrow} + \phi_{(n-1)\uparrow, n\downarrow} \\
&\quad + \phi_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \phi_{n\uparrow, (n-1)\downarrow})]. \tag{3.3}
\end{aligned}$$

A partir da equação de Schrödinger independente do tempo, temos que o valor esperado, $\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|E|\psi\rangle$, na representação de Wannier,

$$\begin{aligned}
\langle\psi|E|\psi\rangle &= E \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= E \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}.
\end{aligned}$$

Portanto, a relação de recorrência para a energia é

$$E \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} = (2\varepsilon + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} + J(\phi_{(n+1)\uparrow, n\downarrow} + \phi_{(n-1)\uparrow, n\downarrow} + \phi_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \phi_{n\uparrow, (n-1)\downarrow}). \tag{3.4}$$

A equação acima nos fornece a forma matricial da hamiltoniana 3.1. Por exemplo, ao considerarmos uma rede com $N = 3$, temos a seguinte matriz

$$H = \begin{array}{c|cccccccccc}
 N = 3 & |1,1\rangle & |1,2\rangle & |1,3\rangle & |2,1\rangle & |2,2\rangle & |2,3\rangle & |3,1\rangle & |3,2\rangle & |3,3\rangle \\
 \hline
 \langle 1,1| & 2\varepsilon + U & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle 1,2| & J & 2\varepsilon & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle 1,3| & 0 & J & 2\varepsilon & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\
 \langle 2,1| & J & 0 & 0 & 2\varepsilon & J & 0 & J & 0 & 0 \\
 \langle 2,2| & 0 & J & 0 & J & 2\varepsilon + U & J & 0 & J & 0 \\
 \langle 2,3| & 0 & 0 & J & 0 & J & 2\varepsilon & 0 & 0 & J \\
 \langle 3,1| & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 2\varepsilon & J & 0 \\
 \langle 3,2| & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 2\varepsilon & J \\
 \langle 3,3| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 2\varepsilon + U
 \end{array}$$

Neste cenário, diagonalizaremos a matriz acima para um N do tamanho da rede, através da equação secular $\det(H - \lambda I) = 0$, assim como fizemos no caso do Modelo de Bloch. Da mesma forma, faremos a análise estática do sistema calculando a densidade de estados, já apresentada equação 2.13, contudo devemos substituir $N \rightarrow N^2$, então

$$DOS(E) = \frac{1}{N^2} \sum_{l=1}^{N^2} \delta(E_l - E), \quad (3.5)$$

e também, calcularemos a distância entre os elétrons, escrita como

$$d(E) = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow - n_\downarrow| |\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}|^2 \quad (3.6)$$

onde assumiremos que $\varepsilon = 0$ e $J = 1$.

3.1 Caso Cristalino

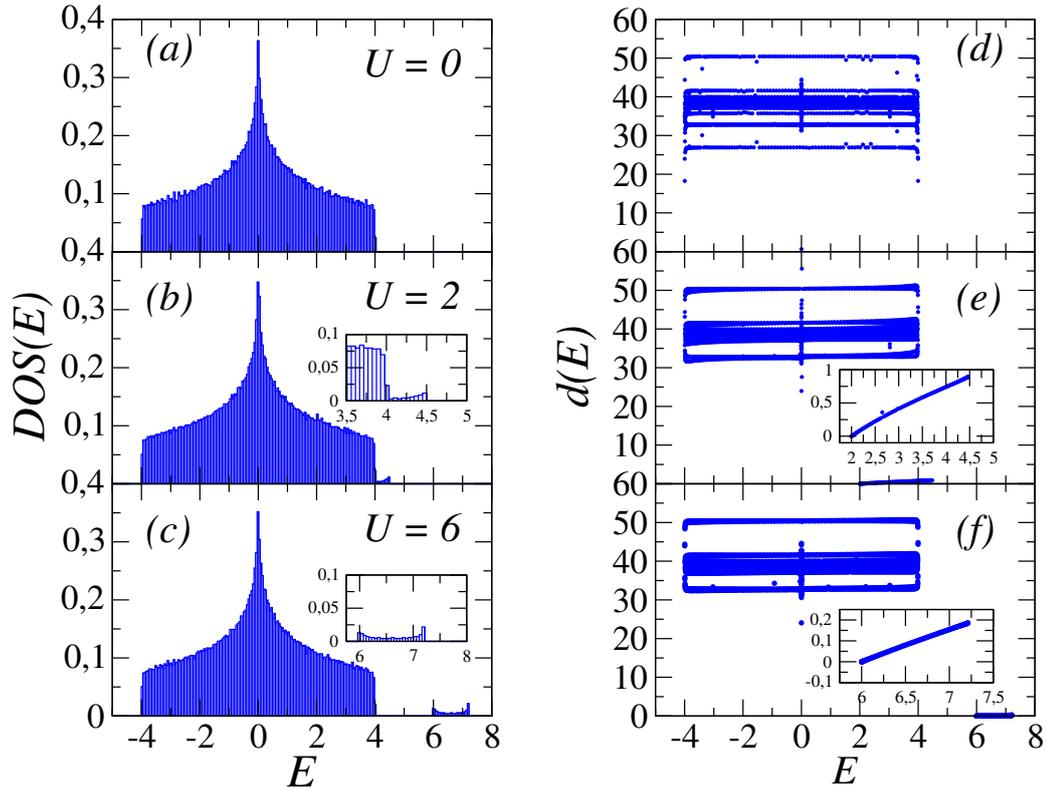
Na figura 3.1, temos a densidade de estados e a distância entre os dois elétrons para uma rede com $N = 115$ e $U = 0, 2, 6$. Primeiramente, podemos observar na densidade de estados, figura 3.1(a-c), que a medida que aumentamos a interação entre os elétrons, há o surgimento de uma sub-banda de estados ligados para valores de interação maiores que zero. Entretanto, para valores pequenos de interação há uma superposição entre a banda principal (de estados não-ligados) e a sub-banda (de estados ligados), como é o caso de $U = 2$. Contudo a sub-banda torna-se mais evidente à medida que a interação entre os elétrons é mais forte, como é visto em $U = 6$, onde ela já está totalmente separada da banda principal.

Claro e colaboradores[13]³, mostraram através de cálculos analíticos que os limites da

³Na densidade de estados na ausência de interação, temos a mesma configuração apresentada no modelo de Anderson 2d. Este resultado foi, também apresentado por Claro e colaboradores[13], onde eles propõem uma equivalência entre o modelo para N elétron interagentes em um rede unidimensional e o modelo de um único elétron em em rede N -dimensional, tendo as interfaces dividindo o espaço em domínios simétricos.

banda de estados ligados são dados por $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$. Assim, a separação das duas bandas ocorre somente para $U > 4J^2$. Esses limites estão calculados no apêndice C. Se considerarmos $U = 6$, temos que a banda de estados ligados deve estar entre $6 \leq E \leq 7.21$, o que é evidenciado na figura 3.1(c).

Figura 3.1: **(a-c)** Densidade de estados para $U = 0, 4, 6$ e $N = 115$ de dois elétrons interagentes em um rede cristalina. **(d-f)** Distância entre os dois elétrons para $U = 0, 4, 6$.



Fonte : Autor, 2022.

A relação da distância entre os elétrons em função energia é mostrada na figura 3.1(d-f). Esta nos permite fazer uma análise mais detalhada dessa nova banda de estados ligados. Para a banda de estados não-ligados, observamos que os auto-estados presentes nessa banda exibem uma distância média entre os dois elétrons de aproximadamente $d \approx 35$. No entanto, quando a interação se faz presente no sistema, a distância entre os elétrons diminui com o aumento da interação que está restrita ao limite $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$. Para $U = 4$, por exemplo, temos que a distância média é $d \approx 0.5$ e para $U = 6$ vemos que $d \approx 0.1$.

Agora, na intenção de investigar os aspectos dinâmicos do sistema, calculamos o valor esperado para a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$\langle \psi | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle. \quad (3.7)$$

Ao realizarmos um procedimento análogo ao realizado anteriormente, obtemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} = (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow})\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) + J(\phi_{(n+1)\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n+1)\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n-1)\downarrow}(t)). \quad (3.8)$$

Resolvemos numericamente a equação acima através da expansão em serie de Taylor do operador evolução temporal em FORTRAN,

$$\Gamma(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{l_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}, \quad (3.9)$$

onde l_0 é a ordem da expansão considerando $\hbar = 1$. Assim, a função de onda em um tempo Δt é representado por $|\phi(\Delta t)\rangle = \Gamma(\Delta t)|\phi(t=0)\rangle$. A condição inicial do sistema sera considerada um pacote gaussiano, dado pela equação 3.10

$$\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t=0) = \frac{1}{A(\sigma)} \exp\left\{-\frac{(n_\uparrow - n_\uparrow^0)^2}{4\sigma^2}\right\} \exp\left\{-\frac{(n_\downarrow - n_\downarrow^0)^2}{4\sigma^2}\right\} \quad (3.10)$$

com $n_\uparrow^0 = N/2 + d_0$ e $n_\downarrow^0 = N/2 - d_0$ sendo a posição inicial dos elétrons, σ a largura do pacote de onda, consideraremos $\sigma = 1$ e $A(\sigma)$ é a constante de normalização.

Para fazer a análise dinâmica do sistema, calcularemos a extensão espacial da função de onda, que nos da ideia do raio do pacote de onda no plano formado pelos dois elétrons (n_\uparrow x n_\downarrow),

$$\xi(t) = \sqrt{(n_\uparrow - \langle n_\uparrow(t) \rangle)^2 + (n_\downarrow - \langle n_\downarrow(t) \rangle)^2} |\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t)|^2, \quad (3.11)$$

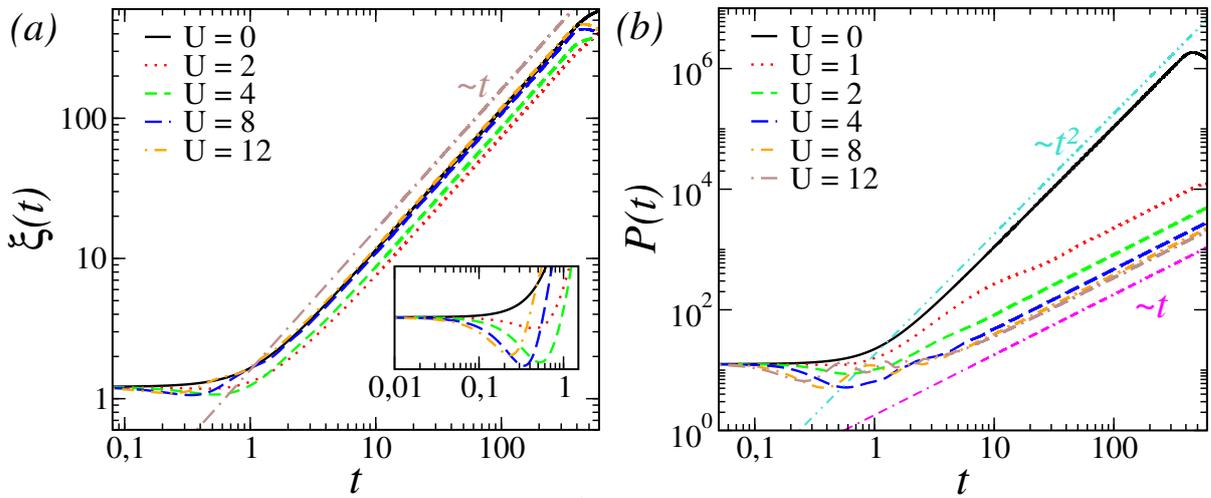
com

$$\langle n_s(t) \rangle = \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} s |\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t)|^2 \quad (3.12)$$

representando o centroide da função de onda (posição média da função de onda). Além disso, calcularemos a função participação, equação 2.14.

Na figura 3.2, temos a extensão espacial 3.2(a) e a função participação 3.2(b). Calculada para a rede de tamanho $N = 1500$ com $d_0 = 0$. Observamos que a extensão espacial aumenta linearmente com o tempo ($\xi \propto t$), independente do valor de interação, caracterizando assim, o comportamento balístico da função de onda, como apresentando na literatura [21, 23]. Contudo, para regime de tempo inicial, observamos que a presença de interação enfraquece a extensão espacial [21, 23]. Esta redução é associada a existência de estados ligados. Já para a participação, nota-se que na ausência de interação, a participação aumenta quadraticamente com o tempo ($P \propto t^2$), ou seja, uma vez que a participação nos diz a região do espaço onde a função de onda difere significativamente de zero, podemos dizer que a função de onda se espalha uniformemente pela rede. Já a medida que U aumenta temos que a participação cresce mais lentamente com o tempo, isto é $P \propto t$.

Figura 3.2: **(a)** Extensão espacial e **(b)** função participação para um rede com $N = 1500$ para diferentes valores de interação até um tempo $t = 600$ e $\Delta t = 0.01$.



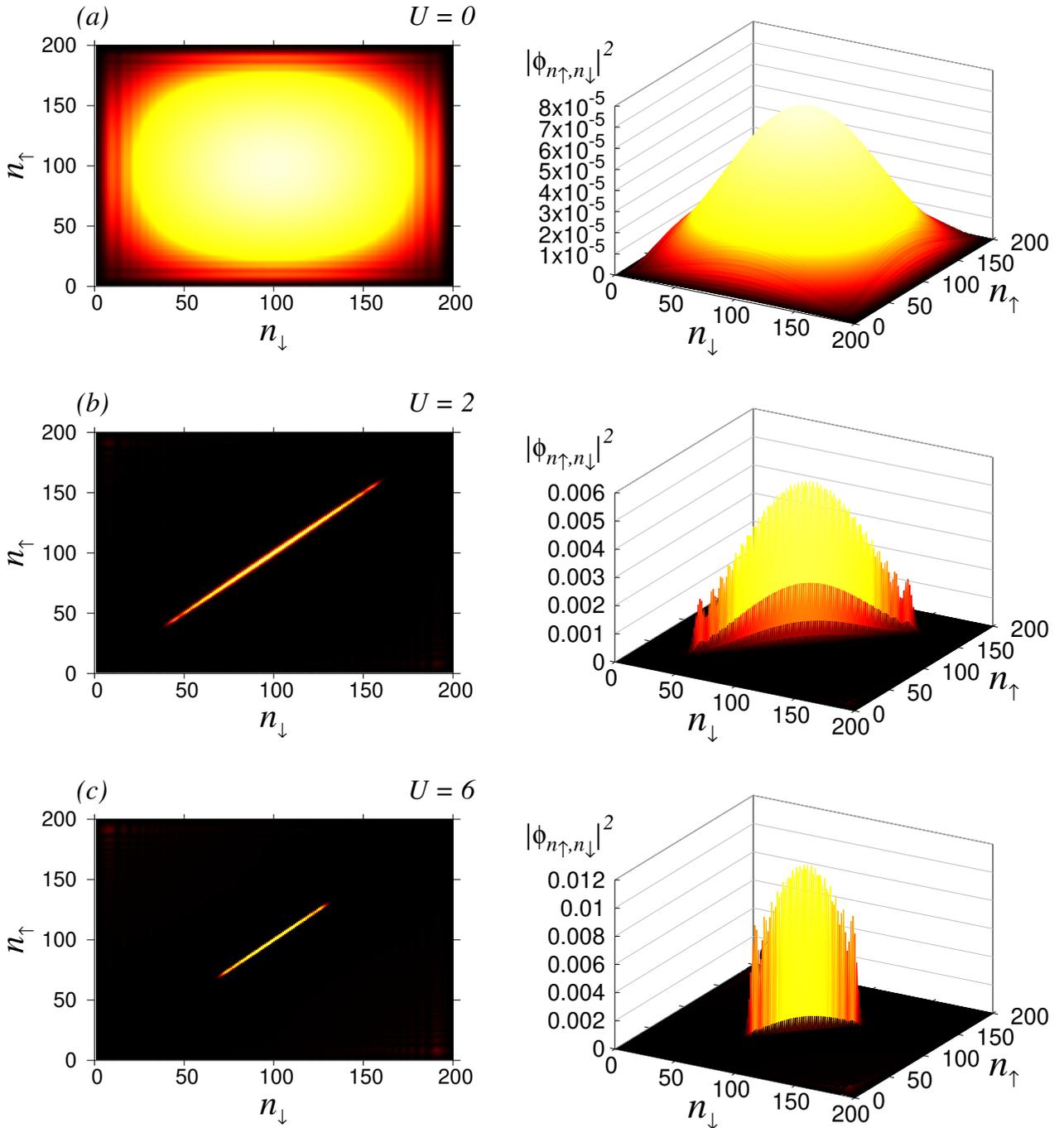
Fonte : Autor, 2022.

Para entender melhor essa alteração no comportamento da participação, analisaremos a amplitude de probabilidade, $|\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}|^2$ no plano formado pelo dois elétrons, $n_\uparrow \times n_\downarrow$. Consideraremos $N = 200$ e para um tempo suficiente longo para que a função de onda se alargue até as bordas da rede, como mostrado na figura 3.3.

Na ausência de interação, vemos que os elétrons se espalham por toda a rede (figura 3.3(a)). Como os elétrons são postos inicialmente juntos temos o máximo da amplitude de probabilidade em $n_\uparrow = n_\downarrow = N/2$. Entretanto, quando temos interação no sistema, figuras 3.3(b - c), a porção do espaço que os elétrons ocupam está restrita a uma pequena região em torno de $n_\uparrow = n_\downarrow$. À medida que a interação aumenta essa região diminui, podemos interpretar esse comportamento, através do surgimento da banda de estados ligados observada anteriormente. Ou seja, os estados ligados fazem com que o movimento do elétron estejam fortemente correlacionados, de tal forma que eles se movimentem coerentemente ocupando o mesmo sítio.

Agora, apresentaremos o cálculo da amplitude de probabilidade em função do tempo, para quatro regimes de tempo distintos. Considerando mais uma vez, uma condição inicial gaussiana (equação 3.10) com $\sigma = 1$ para uma rede com $N = 1000$ e valores de $U = 0, 4$ e 12 . Na figura 3.4, podemos observar que a ausência de interação não altera a forma da função de onda com o passar do tempo. Já na presença de interação, podemos observar que a função de onda apresenta um pico centrado em $N/2$ e dois outros dois picos simétricos, com os picos laterais comportando-se como uma frente de onda. Essas estruturas centrais. As frentes de ondas tem origem nos estados ligados e são responsáveis pelo comportamento observado na extensão espacial. Observamos também que, quanto maior for a interação menor é a largura do pico central e maior as dos laterais, o mesmo acontece para a amplitude das frentes de ondas. Nesse cenário, as amplitudes das frentes de onda ocupam uma região relevante no decorrer da evolução, essa região é o que reflete na mudança de comportamento da participação, onde os nossos resultados estão em completo acordo com a literatura [21].

Figura 3.3: Amplitude de probabilidade de dois elétrons com interação local no plano n_{\uparrow} x n_{\downarrow} , para um rede com $N = 200$, $\Delta t = 2^{-4}$, l_0 e $U = 0, 2$ e 6 .

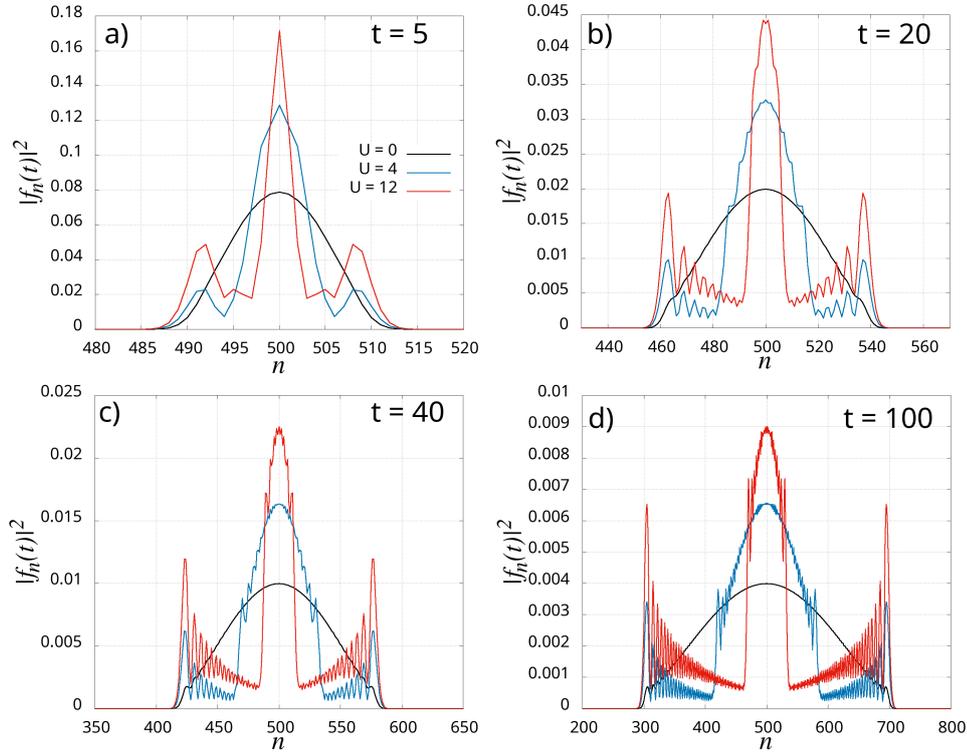


Fonte : Autor, 2022.

3.2 Caso Cristalino com Campo Elétrico

Até momento nos concentramos em entender o papel da interação entre elétron isoladamente. Agora iremos acrescentar o campo elétrico no sistema como discutimos na seção 2.2, onde vimos que fenômenos interessantes surgem devido a presença do campo

Figura 3.4: Função de onda eletrônica após um longo tempo de evolução com uma cadeia de $N = 1000$ e $U = 0, 4, 12$ e **a)** $t = 5$, **b)** $t = 20$, **c)** $t = 40$ e **d)** $t = 100$.



Fonte : Autor, 2022.

elétrico em sistemas de elétrons interagentes[16, 20]. De maneira análogo ao caso anterior a hamiltoniana do modelo, pode ser escrita como,

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s (\varepsilon + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s}, \quad (3.13)$$

onde que o campo elétrico constante é representando por F que é aplicado externamente paralelo a rede, \mathbf{n}_s é o operador posição e a é o espaçamento da rede. Como fizemos anteriormente, expandimos na representação de Wannier e resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo para a hamiltoniana 3.13 (em detalhes no apêndice F), para obtemos a seguinte relação de recorrência

$$i\hbar \frac{d}{dt} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} = (2\varepsilon + U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + eaF(n_\uparrow + n_\downarrow)) \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) + J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}(t)). \quad (3.14)$$

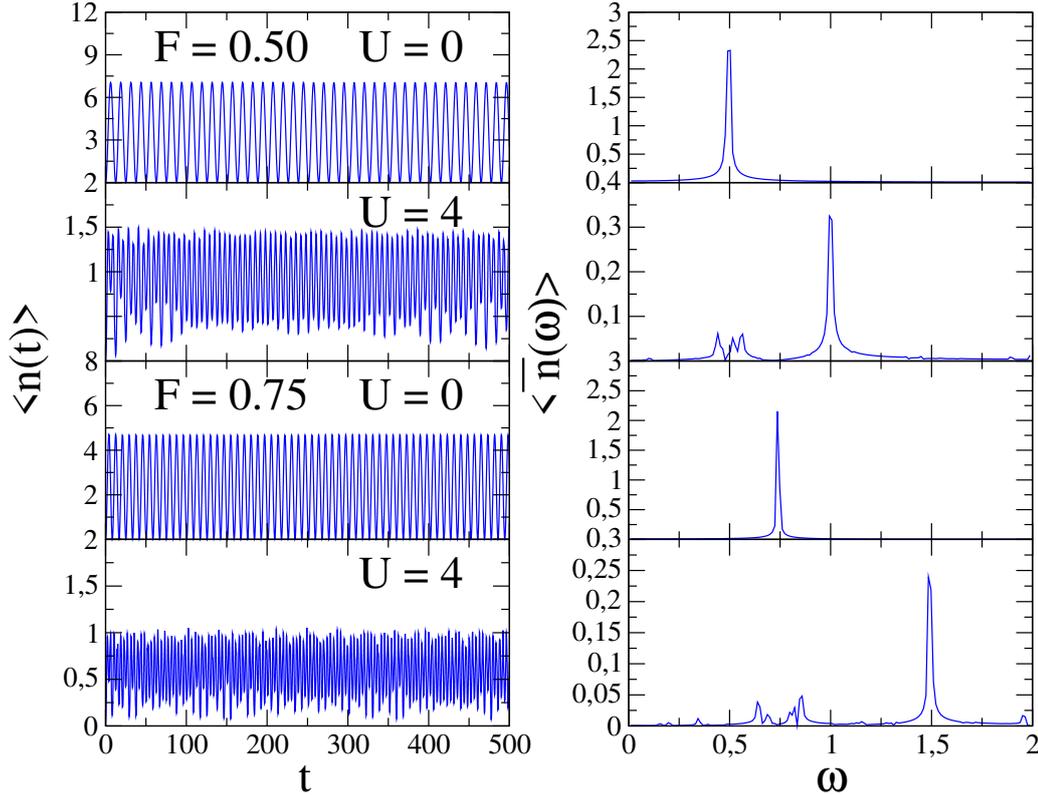
Para obtemos a dinâmica do centroide da função de onda (equação 3.12) seguimos utilizando a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal, mostrado na equação 3.9. Utilizaremos, $l_0 = 20$, $\Delta t = 2^{-9}$, com a condição inicial sendo um pacote de onda gaussiano (equação 3.10) de largura $\sigma = 1$.

Além do cálculo do centroide, apresentaremos, também, a sua transformada de Fourier, que nos dá o centroide no espaço das frequências, ω ,

$$\langle \bar{n}_s(\omega) \rangle = \mathcal{F} \{ \langle n_s(t) \rangle \} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle n_s(t) \rangle e^{-i\omega t} dt, \quad (3.15)$$

calculamos computacionalmente a Transformada de Fourier Rápida (FTT).

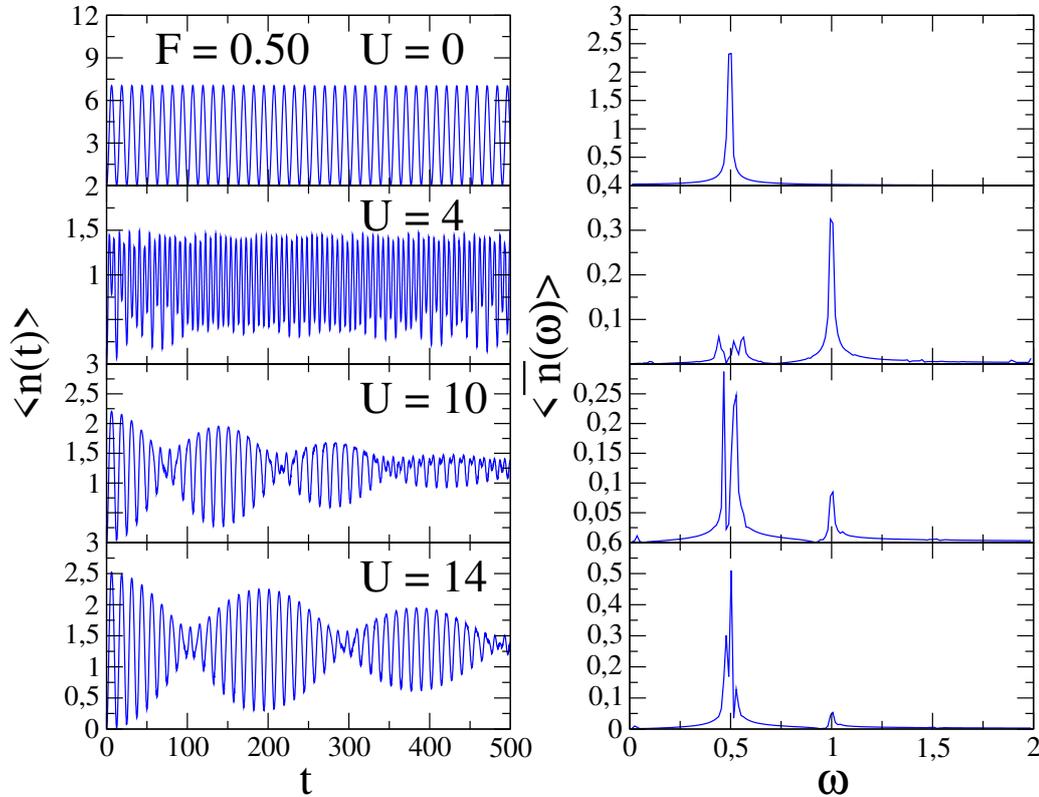
Figura 3.5: Centroide da função de onda para um campo $F = 0.50$ e $F = 0.75$ para $U = 0$ e 4 ao lado suas respectivas transformadas de Fourier. Consideramos uma rede com $N = 120$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte : Autor, 2022.

Inicialmente, consideramos uma rede de $N = 120$ com $\varepsilon = 0$, $J = 1$ e $e = \hbar = a = 1$ com os elétrons no mesmo sítio, isto é, $d = 0$ e com uma condição dada por um pacote gaussiano com $\sigma = 1$. Assim, na figura 3.5, temos o centroide da função de onda e a sua transformada de Fourier para cada caso. Vemos inicialmente que, para $U = 0$, temos que o sistema apresenta oscilações coerentes e com uma frequência bem definida, $\omega = F$ que é a frequência de Bloch. Em $U = 4$, vemos um padrão de oscilação mais ruidoso, no qual a transformada de Fourier nos mostra que a frequência predominante no sistema é $\omega = 2F$, ou seja, tivemos um dobramento da frequência, que está intimamente ligado a existência dos estados ligados que promove o movimento coerente dos elétrons [15, 22, 23, 66]. Podemos, imaginar então, a evolução dos elétrons propagando-se coerentemente como uma única partícula de carga “2e”, como vimos na seção 3.1. Também, podemos observar que a presença da interação diminuiu a amplitude de oscilação. Para um valor do campo maior $F = 0.75$, podemos observar a presença dessas características, e neste caso, temos um diminuição da amplitude de oscilação, como mostrado na equação 2.27.

Figura 3.6: Centroide da função de onda para um campo $F = 0.50$ para $U = 0, 4, 10$ e 14 ao lado suas respectivas transformadas de Fourier. Consideramos uma rede com $N = 120$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte : Autor, 2022.

Na intenção de verificar o comportamento para valores de interação mais fortes, temos na figura 3.6 o centroide da função de onda e a sua transformada de Fourier. Observamos que, para valores de interação fortes temos que a frequência predominante voltou a ser a frequência de Bloch, $\omega = F$. Isso ocorre devido, o distanciamento energético entre as bandas de estados ligados e não-ligados. Os estados ligados exercem menor influência a medida que a sub-banda se distâcia, favorecendo o *hopping* independente. A modulação no padrão de oscilação que é observado para $U = 10$ e 14 está relacionado com a pequena separação nos picos em $\omega = F$. Tal separação é da ordem de J^2/U para um valor de interação grande e aparece devido à interação elétron-elétron, que também da origem a uma frequência de oscilação adicional da velocidade de deriva de estados ligados[13].

Contudo, sabemos que a interação coulombiana entre os elétrons, não ocorre apenas quando estão no mesmo sítio. O campo produzido pelos elétrons, diminui a medida que eles se afastam. No próximo capítulo, consideraremos que os ele não interagem apenas quando ocupam o mesmo sítio, mas também quando ocupam sítios vizinhos. Essa novo interação não-local promove o surgimento de uma nova banda de estados ligados e é responsável por uma dinâmica correlacionada quando os elétrons ocupam predominantemente os sítios vizinhos.

Capítulo 4

Oscilações de Bloch para Elétrons com Interação local e não-local

Até o presente momento, consideramos a interação que os elétrons sentem apenas quando estão no mesmo sítio, que foi discutido no modelo de Hubbard. Entretanto, existem versões estendidas do modelo de Hubbard [35, 57, 78, 80, 81, 91]. Em muitos casos, assume-se a existência de uma blindagem eletrostática quando os elétrons estão no mesmo íon. Como essa blindagem não é perfeita, pode ocorrer interações não-locais, isto é, além dos elétrons interagirem quando estão no mesmo sítio, haverá uma interação remanescente nos sítios vizinhos. Assim, estudaremos o efeito da interação não-local em uma rede cristalina e na presença do campo elétrico.

Diante dessa nova fenomenologia, a hamiltoniana que descreve o sistema que maneira análoga aos casos anteriores, é

$$H = \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + V \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow}], \quad (4.1)$$

onde ε é a energia *onsite* para o elétron de spin s se ligar ao sítio n , J é o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos, por fim U e V são as interações de natureza coulombiana, U , é a interação local quando os elétrons estão no mesmo sítio, V , é a interação não-local quando os elétrons estão em sítios vizinhos.

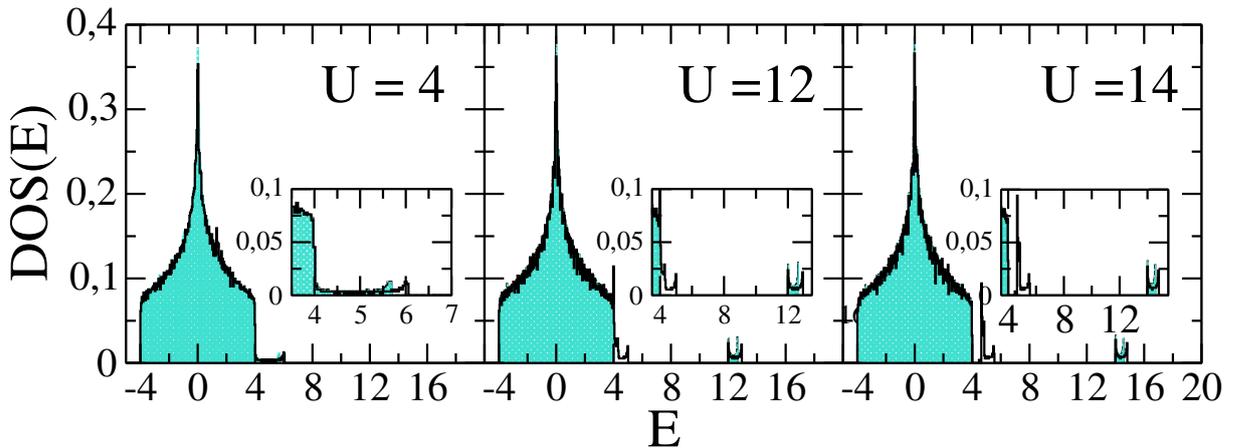
4.1 Caso Cristalino

De forma análoga feita no capítulo anterior, diagonalizamos a hamiltoniana de acordo com a equação abaixo (demonstrada no apêndice D),

$$E\phi_{n\uparrow, n\downarrow} = (2\varepsilon + U\delta_{n\uparrow, n\downarrow} + V(\delta_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \delta_{n\uparrow, (n-1)\downarrow}))\phi_{n\uparrow, n\downarrow} + J(\phi_{(n+1)\uparrow, n\downarrow} + \phi_{(n-1)\uparrow, n\downarrow} + \phi_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \phi_{n\uparrow, (n-1)\downarrow}). \quad (4.2)$$

utilizando as sub-rotinas SSYEVD da biblioteca LAPACK[2]. Consideramos um rede cristalina com $N = 100$, com referencial de energia em $\varepsilon = 0$ e $J = 1$, para valores de interação diferentes. Calculamos inicialmente a densidade de estados normalizada (equação 3.5) mostrada na figura 4.1, na qual o caso sem interação não-local, $V = 0$, representado pela a curva azul claro e para o caso com interação não-local, $V = U/3$, curva preta.

Figura 4.1: Densidade de Estados para um rede com $N = 115$ com diferentes de interação, onde a curva azul claro é o caso sem interação não-local e a preta com interação não-local ($V = U/3$).



Fonte : Autor, 2022.

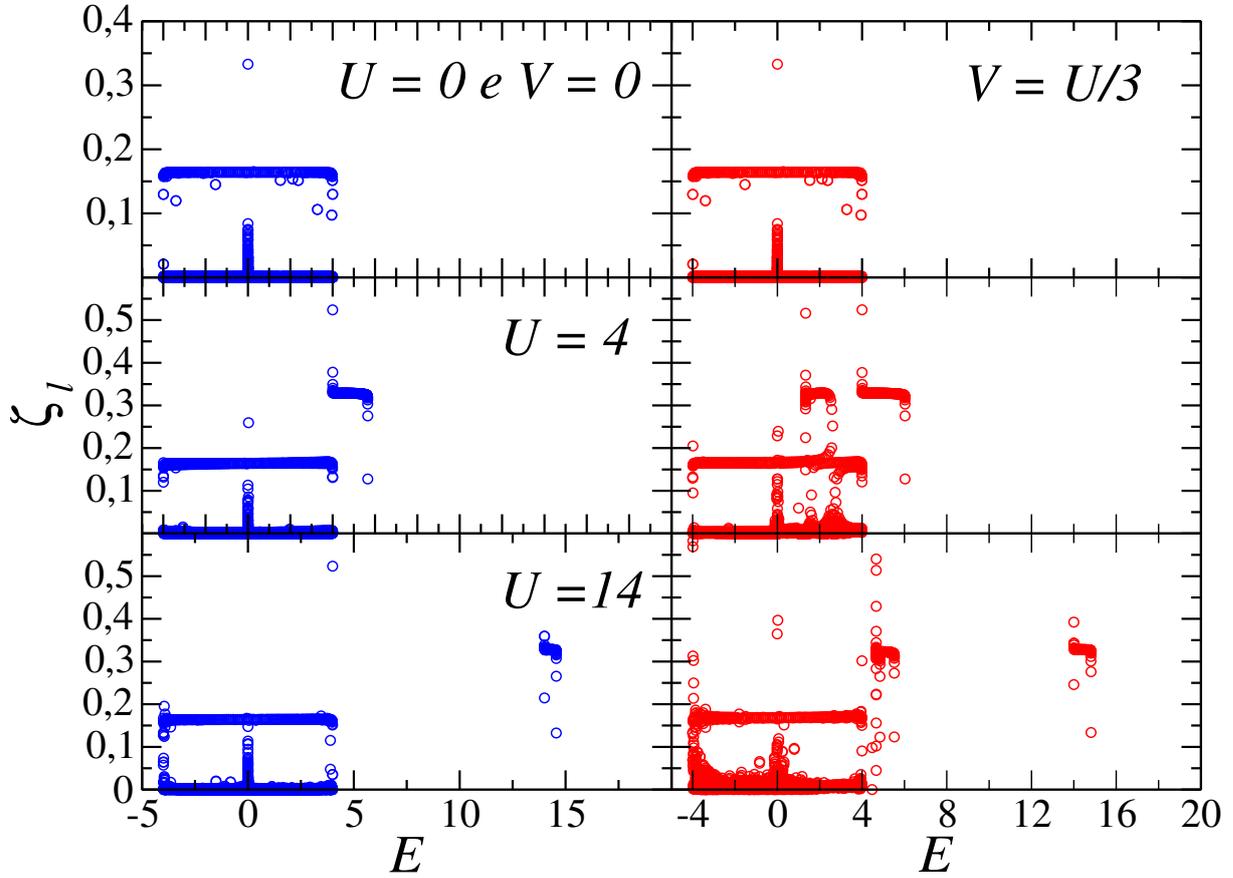
Na densidade de estados observamos o comportamento já descrito para $V = 0$. Já para $V \neq 0$, temos um alargamento na banda de estados ligados em relação a banda de estados ligados para $V = 0$. Além disso é possível observar em $U = 4$, um pico na banda principal indicando uma nova sub-banda de estados ligados, referente a interação não-local, em $U = 12$ vemos essa nova sub-banda se separando da banda principal, isso fica mais evidente em $U = 14$ quando ela está completamente separada da banda principal. Os limites dessa nova sub-banda estão calculados no apêndice E, onde encontramos analiticamente os seguintes limites $U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$ para os estados ligados da interação local e $V \leq E \leq V + 4J^2/V$ para interação não-local, o que está de acordo com os resultados apresentados [66].

Vimos que essa nova sub-banda surge devida a novo interação no sistema, que está relacionada ao estados ligados. Podemos ver isso através da função correlação dada por

$$\zeta_l = \left| \frac{\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle_l - \langle n_\uparrow \rangle_l \langle n_\downarrow \rangle_l}{\langle n_\uparrow \rangle_l \langle n_\downarrow \rangle_l} \right|. \quad (4.3)$$

Aqui $\langle n_\uparrow \rangle_l$ é o centroide do estado l e $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle_l$ é a média simultânea mais provável para os dois elétrons no estado l .

Figura 4.2: Correlação para um rede com $N = 115$ para diferentes valores de interação local, U , e não-local, ($V = U/3$), no qual as figuras azul representa a rede sem interação não-local e a vermelha com interação não-local.



Fonte : Autor, 2022.

Na figura 4.2, vemos claramente o forte regime de correlação para a banda de estados ligados associada a U , na ausência de interação não-local $V = 0$ (curva azul). Para o caso em que temos interação não-local, observamos o mesmo efeito referente a banda de estados ligados associada a U . Contudo, vemos também que, para a banda de estados ligados associada a V , temos uma forte correlação entre os elétrons mesmo com as bandas sobrepostas e fica mais acentuada a medida que aumentamos o valor de interação, esse resultado nos sugere que todos os estados contidos nessa banda são ligados.

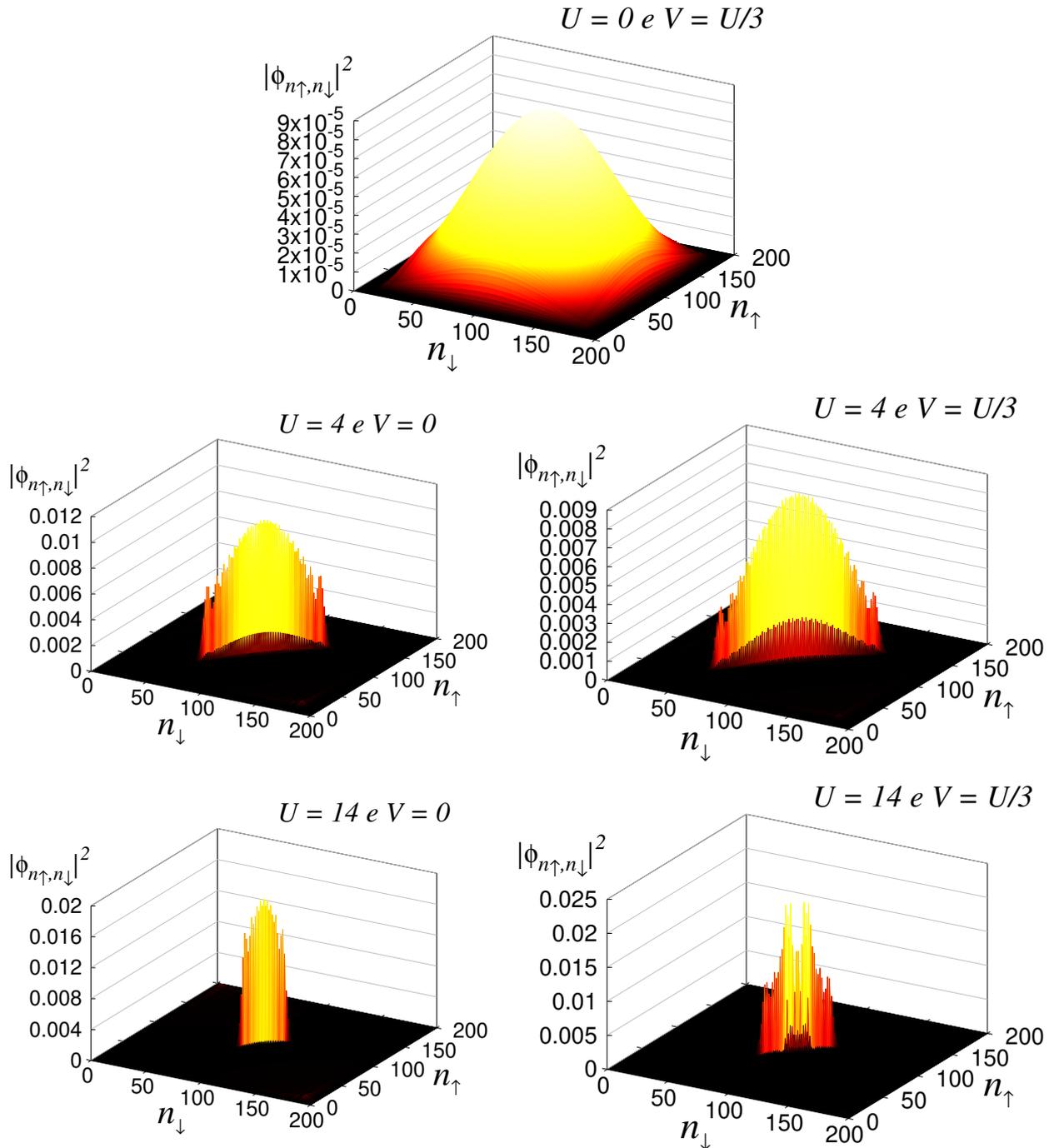
Para fazermos uma análise da evolução temporal do pacote de onda resolvemos a seguinte equação,

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n\uparrow, n\downarrow} + V(\delta_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \delta_{n\uparrow, (n-1)\downarrow})) \phi_{n\uparrow, n\downarrow}(t) \\
 &+ J(\phi_{(n+1)\uparrow, n\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)\uparrow, n\downarrow}(t) + \phi_{n\uparrow, (n+1)\downarrow}(t) + \phi_{n\uparrow, (n-1)\downarrow}(t)), \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

utilizamos a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal, mostrado na equação 3.9. Utilizaremos, $l_0 = 20$, $\Delta t = 2^{-9}$, com a condição inicial sendo um pacote de onda gaussiano (equação 3.10) de largura $\sigma = 1$. Considerando uma rede com $N = 200$,

calculamos a amplitude de probabilidade no plano formado pelos dois elétrons para um tempo suficientemente longo.

Figura 4.3: Amplitude de probabilidade de dois elétrons com interação local no plano n_{\uparrow} x n_{\downarrow} , para um rede com $N = 200$, $\Delta t = 2^{-4}$, l_0 e $U = 0, 2$ e 6 .



Fonte : Autor, 2022.

Observamos na figura 4.3, o comportamento já discutido para o caso em que $V = 0$. No caso com a adição da interação não-local vemos que o caráter da função de onda permanece o mesmo. Contudo, temos um alargamento do seguimento de rede onda a

dinâmica correlacionada dos elétrons ocorre. Isso está diretamente associado, ao fato que a interação não-local promove um alargamento na banda de estados ligados referente a U e ao surgimento de uma nova banda de estados ligados induzida pela interação não-local. Também, observamos que para $U = 14$, temos uma alteração no perfil da amplitude da função de onda, que ocorre devido a presença da interação não-local, V , que proporciona um novo tipo de correlação entre os elétrons, como vimos para valores de interação relativamente forte tem que a banda de estados ligados referente a V começa a se separar da banda principal, assim a presença dessa nova banda e refletida no perfil da função de onda.

4.2 Caso Cristalino com Campo Elétrico

Assim como no capítulo anterior, iremos adicionar agora o campo elétrico no sistema. De forma análoga, a hamiltoniana do sistema com interação não-local e campo elétrico é

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s (\varepsilon + eEa\vec{n}_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + V \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow}]. \quad (4.5)$$

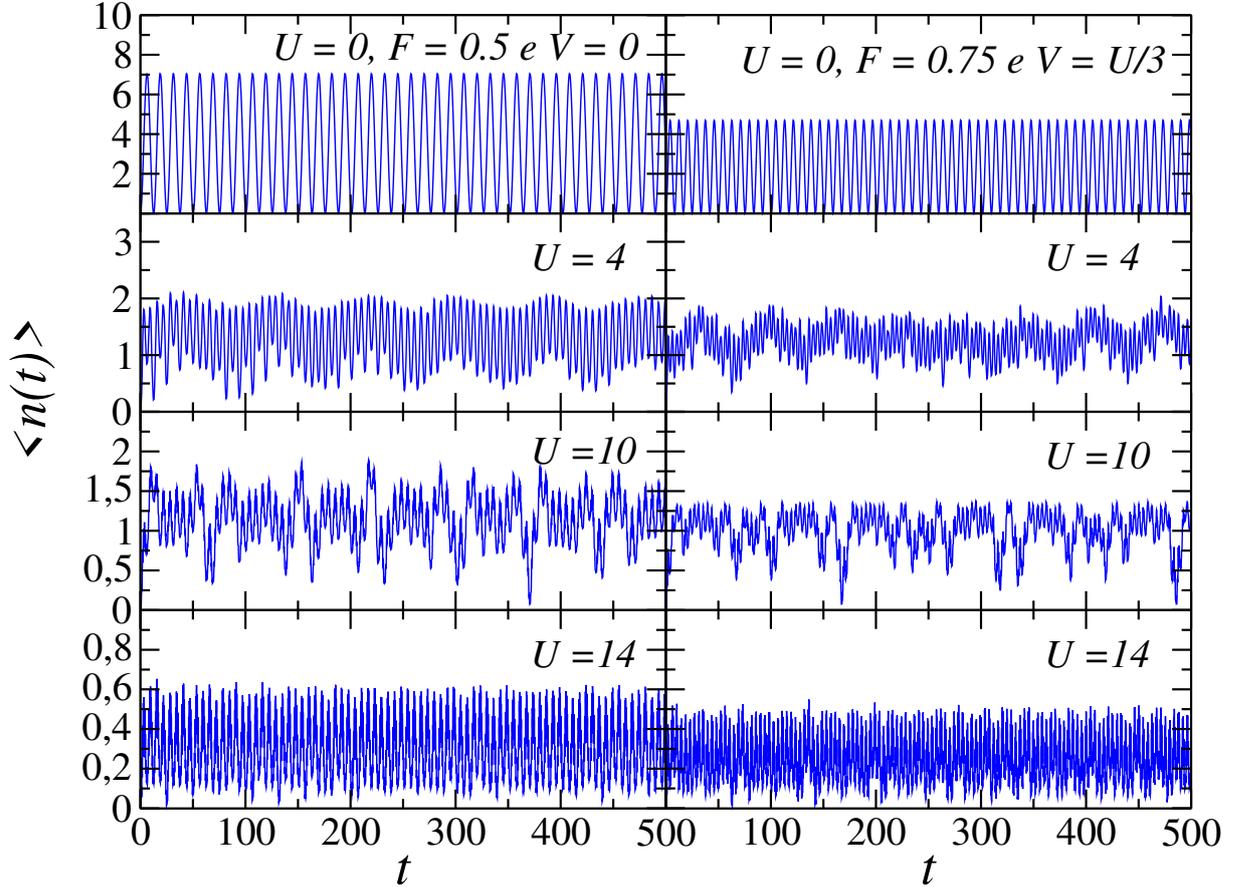
Resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo para a hamiltoniana 4.5 (em detalhes no apêndice G). Expandimos na representação de Wannier (equação 3.2) e obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} = (2\varepsilon + U\delta_{n\uparrow, n\downarrow} + V(\delta_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \delta_{n\uparrow, (n-1)\downarrow}) + eaE(n_\uparrow + n_\downarrow)) \phi_{n\uparrow, n\downarrow}(t) + J(\phi_{(n+1)\uparrow, n\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)\uparrow, n\downarrow}(t) + \phi_{n\uparrow, (n+1)\downarrow}(t) + \phi_{n\uparrow, (n-1)\downarrow}(t)). \quad (4.6)$$

Para obtemos a dinâmica do centroide da função de onda, equação 3.12 e sua transformada de Fourier equação 3.15, seguimos utilizando a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal, mostrado na equação 3.9. Utilizaremos, $l_0 = 20$, $\Delta t = 2^{-9}$, com a condição inicial sendo um pacote de onda gaussiano (equação 3.10) de largura $\sigma = 1$.

Primeiramente, assim como fizemos na seção 3.2, analisamos o centroide da função de onda para um rede $N = 200$ e $F = 0.50$ e 0.75 para valores distintos de interação e consideramos $V = U/3$, como mostrado na figura 4.4. Assim, observamos que a amplitude de oscilação diminui com o aumento da interação devido a presença dos estados ligados relacionados a interação de primeiros vizinhos, uma vez que para valores de U alto temos que o movimento predominante é uma propagação coerente entre os elétrons. Além disso nota-se que o padrão de oscilação não assume uma forma regular para valores de interação intermediário. Podemos associar esse comportamento, ao fato de que, nesse intervalo de interação, temos tanto a banda de estados ligados do tipo *on-site* que sofreu um alargamento devido a presença de V , quanto a banda de estados ligados de primeiros vizinhos. Então, devido a existência de duas bandas de estados ligados, temos efeitos competitivos no sistema, resultando em um padrão bastante ruidoso.

Figura 4.4: Centroide da função de onda na presença de interação local e não-local, para diferentes valores de interação. Na coluna esquerda temos o caso sem interação não-local, $V = 0$, na direita temos interação não-local $V = U/3$. A campo aplicado foi $F = 0.5$ e 0.75 com $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.

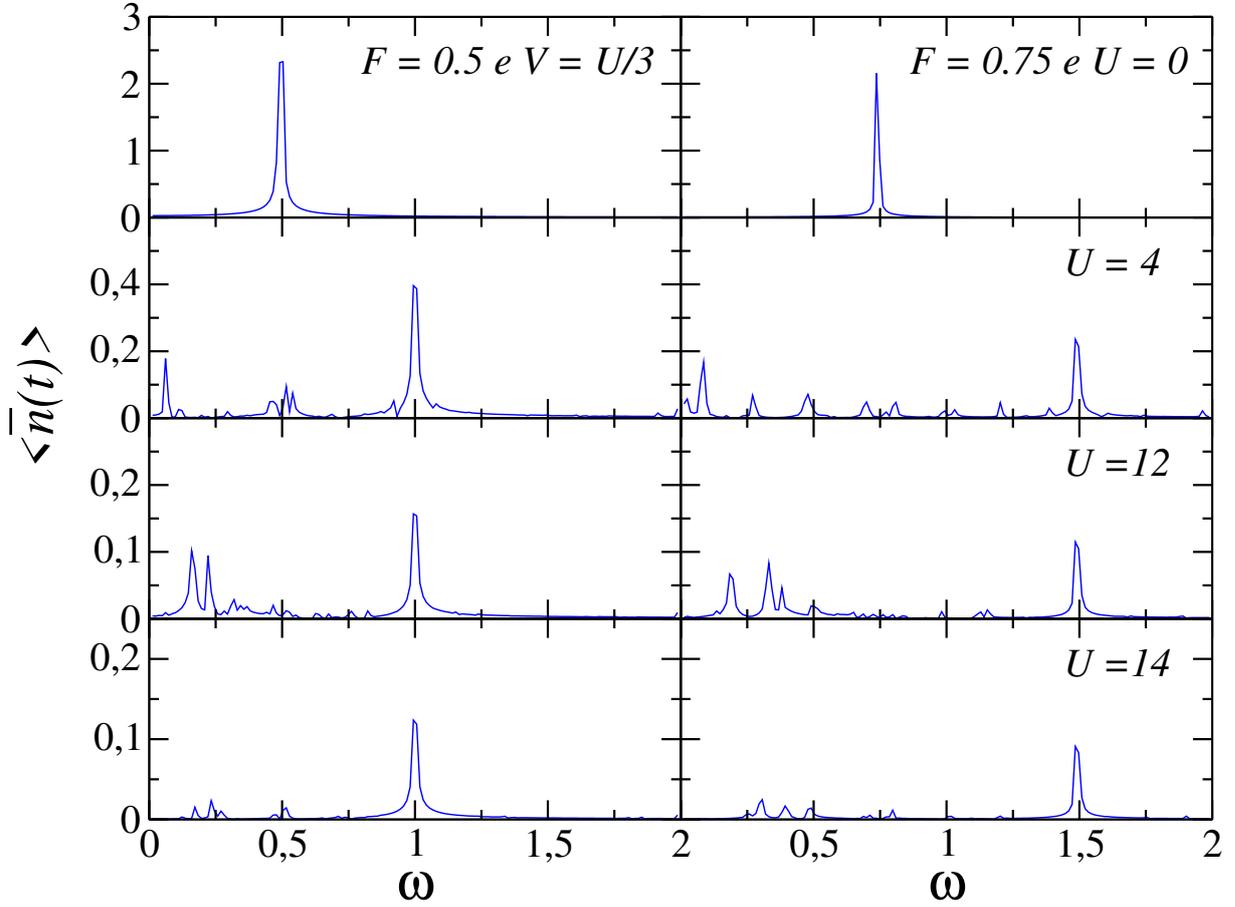


Fonte : Autor, 2022.

Ao analisarmos o centroide no espaço das frequências, figura 4.5, vemos a existência de vários ruídos de baixa frequência, que está intimamente ligada a uma competição entre os estados que favorecem o movimento coerente de elétrons que estão no mesmo sítio, do movimento coerente de elétrons que estão em sítios vizinhos e o do movimento independente dos elétrons. Isso acontece devido a superposição da banda de estados ligados com a banda de estados ligados referente a V , na qual temos valores de energia degenerados, promovendo oscilações não coerentes como vimos na figura 4.4. Entretanto, para $U = 12$, ainda observamos esse comportamento, apesar de sabemos que a banda de estados ligados está quase separada da banda principal. Vale destacar, também, que a medida que aumentamos a interação temos as duas bandas de estados ligados completamente separada da banda principal, reduzindo os modos de baixa frequência na transformada de Fourier. Além disso, podemos ver que a frequência predominante permanece sendo a frequência dobrada. Dessa forma, o comportamento do sistema devido a competição dos estados nos faz intuir que o sistema apresenta um comportamento não-monotônico que depende do intervalo de interação ora favorece os estados ligados ora favorece os estados não ligados.

Na intenção de obter uma descrição mais detalhada para a competição entre os estados

Figura 4.5: Transforma de Fourier do centroide da função de onda para uma rede $N = 200$, para diferentes valores de interação com $V = U/3$, campo $F = 0.5$ e 0.75 e $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte : Autor, 2022.

não-ligados e os dois estados ligados, calcularemos a media das probabilidades de dupla ocupação,

$$PDO(t) = \sum_{\substack{n\uparrow, n\downarrow \\ n\uparrow=n\downarrow}} |\phi_{n\uparrow, n\downarrow}(t)|^2 \quad (4.7)$$

probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos

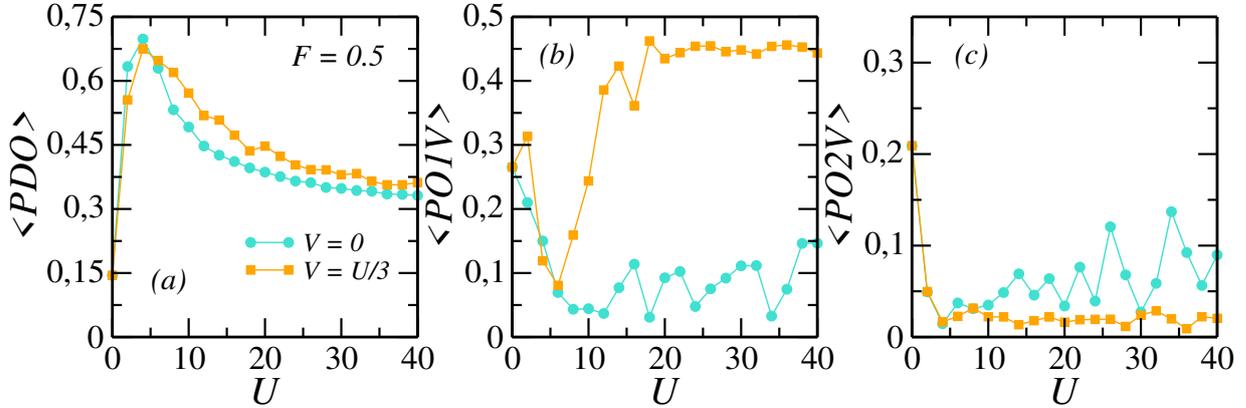
$$PO1V(t) = \sum_{\substack{n\uparrow, n\downarrow \\ n\uparrow=n\downarrow\pm 1}} |\phi_{n\uparrow, n\downarrow}(t)|^2, \quad (4.8)$$

e a de ocupação de segundos vizinhos

$$PO2V(t) = \sum_{\substack{n\uparrow, n\downarrow \\ n\uparrow=n\downarrow\pm 2}} |\phi_{n\uparrow, n\downarrow}(t)|^2, \quad (4.9)$$

para um tempo suficientemente longo em função da interação entre os elétrons. Consideramos um rede com $N = 100$ e fizemos essas curvar pra um único valor de campo elétrico $F = 0.5$, tanto pra $V = 0$ quanto para $V = U/3$.

Figura 4.6: Media das probabilidades de dupla ocupação, ocupação de primeiros vizinhos e segundos vizinhos, com interação não-local ($V = U/3$) e sem ($V = 0$) em um função da interação, U , para um tempo suficientemente longo, com $N = 200$, $F = 0.5$, $\Delta t = 2^{-9}$ e $l_0 = 20$.



Fonte : Autor, 2022.

Na figura 4.6, vemos o comportamento não-monotônico da probabilidade de dupla ocupação, na qual para valores iniciais de U a PDO cresce até um ponto máximo, em torno de $U \approx 4$. A medida que U ultrapassa esse valor temos a diminuição da probabilidade de dupla ocupação. Isso explica o dobramento da frequência para $U = 4$ no gráfico 3.6 e a re-amplificação em $U = 10$. Esse comportamento não-monotônico é extremamente semelhante para os dois casos, contudo, temos que na presença de V a probabilidade em alguns valores de interação assume uma probabilidade maior. Podemos atribuir esse fato ao alargamento da banda de estados ligados *on-site*.

Através da curva da PO1V, figura 4.6(b), vemos um comportamento totalmente diferente para os dois casos. Para $V = 0$, vemos que a probabilidade de ocupação dos primeiros vizinhos diminui com o aumento da interação. Já no caso em que $V = U/3$, vemos que para valores iniciais de interação a PO1V também diminui, porém a partir de um certo valor de interação ela aumenta. Isso ocorre para valores de U no qual a nova banda separa-se da banda principal, favorecendo assim a ocupação de primeiros vizinhos. Vemos também que PO1V satura para valores altos de interação, mostrando a predominância da dinâmica coerente das oscilações quando as partículas ocupam os sítios vizinhos, de tal forma que o sistema é governado pelos estados ligados. Observamos também que no intervalo de $5 < U < 10$, temos uma diminuição da PO1V, justificando o comportamento para $U = 8$, em que a frequência de Bloch supera o dobramento da frequência.

Por fim na figura 4.6(c), temos a probabilidade de segundos vizinhos. Podemos observar que está, assume valores muito baixos, isto é, a probabilidade em ambos os casos dos elétrons ocuparem os segundos vizinhos é muito baixa. Enfatizando o movimento predominantemente correlacionado quando os elétrons ocupam o mesmo sítio ou os seus vizinhos.

Capítulo 5

Conclusão

No presente trabalho investigamos a presença da interação local e não-local em um sistema de dois elétrons interagentes na presença de um campo elétrico constante aplicado externamente. Ao longo do trabalho reproduzimos resultados presentes na literatura na intenção de validar nossos códigos computacionais e compreender o efeito de cada elemento no sistema. O grande interesse desse sistema é estimulado pela observação do dobramento de frequência das oscilações de Bloch o que vai contra o que é observado em sistemas de muitos corpos.

Utilizando a linguagem FORTRAN, diagonalizamos as matrizes através da biblioteca BLAS E LAPACK e usamos a expansão em serie de taylor do operador evolução temporal. Para fazer a analise tanto estática quanto dinâmica resolvemos a equação de Schrödinger independente e dependente do tempo, como mostrada nos apêndice. Calculamos as seguintes quantidades densidade de estados, participação, correlação, amplitude de probabilidade em função do plano formado pelos dois elétrons, extensão espacial, centroide da função de onda e sua transformada de Furier e as probabilidades de dupla ocupação, ocupação de primeiros vizinhos e de segundos vizinhos.

Para o caso de dois elétrons interagente em um rede cristalina com interação *onsite*, através da densidade de estados observamos que a medida que aumentamos a interação elétron-elétron temos o surgimento de um banda de estados ligados. A extensão espacial nos permitiu observar que independente do grau de interação temos um comportamento balístico do pacote de onda, entretanto a participação, neste caso, apresenta um comportamento não usual, no qual para $U = 0$ temos um comportamento balístico, isto é, $P \propto t^2$, contudo a medida que a interação aumenta temos um comportamento difusivo, $P \propto t$. Mostramos que esse comportamento esta relacionado com a existência de estados ligados devido a interação *onsite*, U , responsável por correlacionar o movimento dos elétrons. Além disso, observemos um o efeito dos estados ligados no perfil da função de onda, fazendo com que tenhamos um pico central em torno da centro da cadeia e dois picos simetricamente distantes cado de um lado do pico central, o caracterizamos esses dois pico como duas frentes de onda. Já ao colocamos campo elétrico no sistema com interação do tipo onsite, observamos que a existância de estados ligados promove uma alta probabilidade de dupla ocupação, que faz com que observemos o dobramento da frequência das oscilações de Bloch.

Para o nosso último caso, onde temos a presença da interação não-local, local e campo elétrico. Inicialmente analisamos o sistema sem o campo elétrico, observamos que a presença da interação não-local traz novas características para o sistema, onde vale destacar que para a banda de estado ligados, sem a presença a interação não-local, temos que essa banda está restrita pelo seguinte intervalo $U \leq E \leq \sqrt{(U)^2 + 16J^2}$, porém a presença da interação não-local promove um alargamento na nessa banda de tal forma a termos agora que $U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$. Além disso, surgiu uma nova banda de estados ligados devido a interação não-local. Dessa forma, as oscilações apresentam uma forma bastante irregular, para esse caso, que esta relacionado com o advento da banda de estados ligados devido a interação entre os primeiros vizinhos, uma vez que para valores iniciais de interação temos um superposição da bande de estados não ligados e essa nova bando, que promove também a existência de modo de baixa frequência, contudo, o dobramento da frequência é conservado.

Referências

- [1] Michael Abraham e Richard Berkovites. “Persistent currents in an interacting 1D disordered ring: Manifestations of the Mott-Hubbard transition”. Em: *Physical Review Letters* 70.10 (1993), pp. 1509–1512. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.1509.
- [2] E. Anderson et al. “LAPACK Users’ Guide”. Em: *Society for Industrial and Applied Mathematic* (1999). ISSN: 00283908. DOI: 10.1016/0028-3908(91)90192-E.
- [3] P W Anderson. “Absence of diffusion in certain random lattices”. Em: *Physical Review* 109.5 (1958), pp. 1492–1505. ISSN: 0031899X. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1492.
- [4] N W Ashcroft e N D Mermin. *Solid State Physics*. Ascroftcerto, 1976.
- [5] Maxime Ben Dahan et al. “Bloch oscillations of atoms in an optical potential”. Em: *Physical Review Letters* 76.24 (1996), pp. 4508–4511. ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.76.4508.
- [6] Felix Bloch. “Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern”. Em: *Zeitschrift für Physik* 52.7-8 (1929), pp. 555–600.
- [7] G Bouzerar, D Poilblanc e G Montambaux. “Persistent currents in one-dimensional disordered rings of interacting electrons”. Em: *Physical Review B* 49.12 (1994), pp. 8258–8262. ISSN: 01631829. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.8258.
- [8] P E de Brito, E S Rodrigues e H N Nazareno. “Dynamics of two interacting electrons in a one-dimensional crystal with impurities”. Em: *Physica B: Condensed Matter* 388.1-2 (2007), pp. 393–403. ISSN: 09214526. DOI: 10.1016/j.physb.2006.06.148.
- [9] A R C Buarque e W S Dias. “Creation and mobility of self-trapped electronic states in nonlinear chains”. Em: *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 63 (2018), pp. 365–372. ISSN: 10075704. DOI: 10.1016/j.cnsns.2018.04.009. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.04.009>.
- [10] A R C Buarque e W S Dias. “Unidirectional quantum walk of two correlated particles: Manipulating bound-pair and unbound wave-packet components”. Em: *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics* 381.37 (2017), pp. 3173–3177. ISSN: 03759601. DOI: 10.1016/j.physleta.2017.08.016. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2017.08.016>.

-
- [11] Krzysztof Byczuk, Walter Hofstetter e Dieter Vollhardt. “Mott-hubbard transition versus Anderson localization in correlated electron systems with disorder”. Em: *Physical Review Letters* 94.5 (2005), pp. 1–4. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.056404.
- [12] Hao Chen et al. “Real-time observation of frequency Bloch oscillations with fibre loop modulation”. Em: *Light: Science and Applications* 10.1 (2021). ISSN: 20477538. DOI: 10.1038/s41377-021-00494-w. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41377-021-00494-w>.
- [13] F Claro, J F Weisz e S Curilef. “Interaction-induced oscillations in correlated electron transport”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 67.19 (2003), pp. 1–4. ISSN: 1550235X. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.193101.
- [14] Michele B Coêlho e W S Dias. “Two-particles bounded states as a mechanism to weaken the Anderson localization in systems with structural disorder”. Em: *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* 124.July (2020), p. 114371. ISSN: 13869477. DOI: 10.1016/j.physe.2020.114371. URL: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114371>.
- [15] Michele B. Coêlho. “A Influência da Interação Elétron-Elétron na Localização de Anderson e na Localização Dinâmica em Sistemas de Baixa Densidade Eletrônica”. Em: *Master’s thesis, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas* (2020), p. 111.
- [16] Giacomo Corrielli et al. “Fractional Bloch oscillations in photonic lattices”. Em: *Nature Communications* 4 (2013), pp. 1–6. ISSN: 20411723. DOI: 10.1038/ncomms2578.
- [17] J H De Boer e E J W Verwey. “Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands”. Em: *Proceedings of the Physical Society* 49.4S (1937), pp. 59–71. ISSN: 09595309. DOI: 10.1088/0959-5309/49/4S/307.
- [18] P E De Brito, E S Rodrigues e H N Nazareno. “Two interacting electrons in one-dimensional deterministic aperiodic systems: Fibonacci and Thue-Morse lattices”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 73.1 (2006), pp. 1–11. ISSN: 10980121. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.014301.
- [19] T Dekorsy et al. “Electro-optic detection”. Em: 50.11 (1994), pp. 8106–8109.
- [20] W S Dias, F A B F De Moura e M L Lyra. “Quantum entanglement and drifting generated by an ac field resonant with frequency-doubled Bloch oscillations of correlated particles”. Em: *Physical Review A* 93.2 (2016), pp. 1–5. ISSN: 24699934. DOI: 10.1103/PhysRevA.93.023623.
- [21] W S Dias, M L Lyra e F A B F De Moura. “The role of Hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons”. Em: *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics* 374.44 (2010), pp. 4554–4558. ISSN: 03759601. DOI: 10.1016/j.physleta.2010.09.005. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2010.09.005>.
- [22] W S Dias et al. “Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 76.15 (2007), pp. 1–6. ISSN: 10980121. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.155124.
-

-
- [23] W. S. Dias. “Propriedades de Transporte em Sistemas de Baixa Dimensionalidade na Presença de Interação”. Em: *PhD thesis, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas* (2011), p. 159.
- [24] Wandearley da Silva Dias. “Dois elétrons Interagentes em Cadeias Cristalinas e Aperiódicas: Efeitos de Campo Elétrico”. Em: *Master’s thesis, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas* (2007), p. 103.
- [25] M. Dragoman et al. “Bloch oscillations at room temperature in graphene/h-BN electrostatic superlattices”. Em: *Nanotechnology* 32.34 (2021). ISSN: 13616528. DOI: 10.1088/1361-6528/ac02e6.
- [26] P Drude. “Zur Elektronentheorie der Metalle”. Em: *Angewandte Chemie International Edition*, 6(11), 951–952. (1900), pp. 566–613.
- [27] P Drude. “Zur Elektronentheorie der Metalle; Galvanomagnetische und thermomagnetische Effecte.” Em: *Annalen der Physik* 11 (1900), p. 433.
- [28] D H Dunlap e V M Kenkre. “Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field”. Em: *Physical Review B* 34.6 (1986), pp. 3625–3633. ISSN: 01631829. DOI: 10.1103/PhysRevB.34.3625.
- [29] Joehen Feldmann et al. “Optical investigation of bloch oscillations in semiconductor superlattices”. Em: *Superlattices and Microstructures* 13.1 (1992), pp. 55–60. ISSN: 10963677. DOI: 10.1006/spmi.1993.1011.
- [30] Klaus Frahm, Axel Müller-Groeling e Jean Louis Pichard. “Effective σ model formulation for two interacting electrons in a disordered metal”. Em: *Physical Review Letters* 76.9 (1996), pp. 1509–1512. ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.76.1509.
- [31] J K Freericks, V M Turkowski e V Zlatić. “Nonequilibrium dynamical mean-field theory”. Em: *Physical Review Letters* 97.26 (2006), pp. 1–4. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.266408.
- [32] E Gambetti-Césare et al. “Disorder-reduced enhancement of the persistent current for strongly interacting electrons in one-dimensional rings”. Em: *Europhysics Letters* 60.1 (2002), pp. 120–126. ISSN: 02955075. DOI: 10.1209/epl/i2002-00328-9.
- [33] C Gaul et al. “Stable bloch oscillations of cold atoms with time-dependent interaction”. Em: *Physical Review Letters* 102.25 (2009), pp. 1–4. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.255303.
- [34] Florian Gebhard. “The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods”. Em: *Springer* 48 (1997), pp. 1–48.
- [35] Shi Jian Gu et al. “Entanglement and quantum phase transition in the extended Hubbard model”. Em: *Physical Review Letters* 93.8 (2004), pp. 1–4. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.086402.
- [36] Xue Yi Guo et al. “Observation of Bloch oscillations and Wannier-Stark localization on a superconducting quantum processor”. Em: *npj Quantum Information* 7.1 (2021), pp. 3–8. ISSN: 20566387. DOI: 10.1038/s41534-021-00385-3.
-

-
- [37] M Gustavsson et al. “Control of interaction-induced dephasing of Bloch oscillations”. Em: *Physical Review Letters* 100.8 (2008), pp. 2–5. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.080404.
- [38] Li Huang et al. “Extended dynamical mean-field study of the Hubbard model with long-range interactions”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 90.19 (2014), pp. 1–19. ISSN: 1550235X. DOI: 10.1103/PhysRevB.90.195114.
- [39] J Hubbard. “Electron correlations in narrow energy bands”. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 276.1365 (1963), pp. 238–257. ISSN: 0080-4630. DOI: 10.1098/rspa.1963.0204.
- [40] J Hubbard. “Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution”. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 281.1386 (1964), pp. 401–419. ISSN: 0080-4630. DOI: 10.1098/rspa.1964.0190.
- [41] J Hubbard. “Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case”. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 277.1369 (1964), pp. 237–259. ISSN: 0080-4630. DOI: 10.1098/rspa.1964.0019.
- [42] Masatoshi Imada, Atsushi Fujimori e Yoshinori Tokura. “Metal-insulator transition”. Em: *Philosophical Magazine Letters* 70 (1998), pp. 1039–1263. ISSN: 13623036. DOI: 10.1080/09500839008206369.
- [43] Y Imry. “Coherent propagation of two interacting particles in a random potential.” Em: *Epl* 30.7 (1995), pp. 405–408. ISSN: 12864854. DOI: 10.1209/0295-5075/30/7/005.
- [44] D Jaksch et al. “Cold bosonic atoms in optical lattices”. Em: *Physical Review Letters* 81.15 (1998), pp. 3108–3111. ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3108.
- [45] Bernhard Kramer e Angus MacKinnon. “Localization: theory and experiment”. Em: *The Physics Teacher* 31.9 (1993), p. 519. ISSN: 0031-921X. DOI: 10.1119/1.2343865.
- [46] C. L. Lawson et al. “Basic Linear Algebra Subprograms for Fortran Usage”. Em: *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 5.3 (1979), pp. 308–323. ISSN: 15577295. DOI: 10.1145/355841.355847.
- [47] Karl Leo. “Interband optical investigation of Bloch oscillations in semiconductor superlattices”. Em: *Semiconductor Science and Technology* 13.3 (1998), pp. 249–263. ISSN: 02681242. DOI: 10.1088/0268-1242/13/3/003.
- [48] Karl Leo et al. “Observation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice”. Em: *Solid State Communications* 84.10 (1992), pp. 943–946. ISSN: 00381098. DOI: 10.1016/0038-1098(92)90798-E.
- [49] Ilay Levie, Raphael Kastner e Gregory Slepyan. “Rabi-Bloch oscillations in spatially distributed systems: Temporal dynamics and frequency spectra”. Em: *Physical Review A* 96.4 (2017), pp. 1–14. ISSN: 24699934. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.043854.
-

-
- [50] Ilay Levie e Gregory Slepyan. “Bloch oscillations in the chains of artificial atoms dressed with photons”. Em: *Applied Sciences (Switzerland)* 8.6 (2018). ISSN: 20763417. DOI: 10.3390/app8060937.
- [51] L P Lévy et al. “Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents”. Em: *Physical Review Letters* 64.17 (1990), pp. 2074–2077. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.64.2074.
- [52] Liang Li et al. “Method for direct observation of Bloch oscillations in semiconductors”. Em: *Optics Express* 26.18 (2018), p. 23844. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.26.023844.
- [53] Elliott H Lieb. “Exact analysis of an interacting bose gas. II. the excitation spectrum”. Em: *Physical Review* 130.4 (1963), pp. 1616–1624. ISSN: 0031899X. DOI: 10.1103/PhysRev.130.1616.
- [54] Elliott H Lieb e Werner Liniger. “Exact analysis of an interacting bose gas. I. the general solution and the ground state”. Em: *Physical Review* 130.4 (1963), pp. 1605–1616. ISSN: 0031899X. DOI: 10.1103/PhysRev.130.1605.
- [55] Elliott H Lieb e F Y Wu. “Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension”. Em: *Physical Review Letters* 20.25 (1968), pp. 1445–1448. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.20.1445.
- [56] Elliott H Lieb e F Y Wu. “The one-dimensional hubbard model: A reminiscence”. Em: *Physical Review A* 321 (2003), pp. 1–27. ISSN: 03784371. DOI: 10.1016/S0378-4371(02)01785-5.
- [57] P B Littlewood. “Collective modes and superconductivity in an extended Hubbard model for copper oxide superconductors”. Em: *Physical Review B* 42.16 (1990), pp. 10075–10089. ISSN: 01631829. DOI: 10.1103/PhysRevB.42.10075.
- [58] Yun Kai Liu et al. “Spatial Bloch oscillations in acoustic waveguide arrays”. Em: *Applied Physics Express* 14.6 (2021). ISSN: 18820786. DOI: 10.35848/1882-0786/ac0481.
- [59] Stefano Longhi. “Photonic Bloch oscillations of correlated particles”. Em: *Optics Letters* 36.16 (2011), p. 3248. ISSN: 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.36.003248.
- [60] Florian Meinert et al. “Bloch oscillations in the absence of a lattice”. Em: (2017).
- [61] O Morsch et al. “Bloch oscillations and mean-field effects of Bose-Einstein condensates in 1D optical lattices”. Em: *Physical Review Letters* 87.14 (2001), pp. 3–6. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.87.140402.
- [62] N F Mott. “The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals”. Em: *Proceedings of the Physical Society. Section A* 62.7 (1949), pp. 416–422. ISSN: 03701298. DOI: 10.1088/0370-1298/62/7/303.
- [63] N F Mott e R Peierls. “Discussion of the paper by de Boer and Verwey”. Em: *Proceedings of the Physical Society* 49.4S (1937), pp. 72–73. ISSN: 09595309. DOI: 10.1088/0959-5309/49/4S/308.
- [64] A Müller-Groeling, H A Weidenmüller e C H Lewenkopf. “INTERACTING ELECTRONS IN MESOSCOPIC RINGS”. Em: 24.5 (1993), pp. 1273–1275. ISSN: 0256307X. DOI: 10.1088/0256-307X/24/5/041.
-

-
- [65] H N Nazareno, P E De Brito e C A A Da Silva. “Propagation of carriers in a one-dimensional quasicrystal”. Em: *Physical Review B* 51.2 (1995), pp. 864–871. ISSN: 01631829. DOI: 10.1103/PhysRevB.51.864.
- [66] A S Peixoto e W S Dias. “The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk”. Em: *Solid State Communications* 242 (2016), pp. 68–73. ISSN: 00381098. DOI: 10.1016/j.ssc.2016.04.027. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2016.04.027>.
- [67] Maria Elisabetta Pezzoli e Federico Becca. “Ground-state properties of the disordered Hubbard model in two dimensions”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 81.7 (2010), pp. 1–11. ISSN: 10980121. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.075106.
- [68] Philipp M Preiss et al. “Strongly correlated quantum walks in optical lattices”. Em: *Science* 347.6227 (2015), pp. 1229–1233. ISSN: 10959203. DOI: 10.1126/science.1260364.
- [69] Rudolf A Römer e Michael Schreiber. “No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential”. Em: *Physical Review Letters* 78.3 (1997), pp. 515–518. ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.515.
- [70] Jun Rui et al. “A subradiant optical mirror formed by a single structured atomic layer”. Em: *Nature* 583.7816 (2020), pp. 369–374. ISSN: 14764687. DOI: 10.1038/s41586-020-2463-x. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41586-020-2463-x>.
- [71] C. P. Schmid et al. “Tunable non-integer high-harmonic generation in a topological insulator”. Em: *Nature* 593.7859 (2021), pp. 385–390. ISSN: 14764687. DOI: 10.1038/s41586-021-03466-7. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41586-021-03466-7>.
- [72] M Schüler et al. “Optimal hubbard models for materials with nonlocal coulomb interactions: Graphene, silicene, and benzene”. Em: *Physical Review Letters* 111.3 (2013), pp. 1–5. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.036601.
- [73] D L Shepelyansky. “Coherent propagation of two interacting particles in a random potential.” Em: 73 (1994), pp. 2607–2610. ISSN: 12864854. DOI: 10.1209/0295-5075/30/7/005.
- [74] P E de Brito da Silva e H N Nazareno. “Propagation of carriers in a random-dimer model. The interplay between disorder and electric field C.A.A.” Em: *Physical Review B* 52.11 (1995), pp. 7775–7778.
- [75] A Sommerfeld. “Zur Elektronentheorie der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik - I. Teil: Allgemeines, Strömungs- und Austrittsvorgänge”. Em: *Zeitschrift für Physik* 47.1-2 (1927), pp. 1–32.
- [76] D Souza e F Claro. “Paired states of interacting electrons in a two-dimensional lattice”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 82.20 (2010), pp. 1–4. ISSN: 10980121. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.205437.
- [77] Steven H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Vol. 53. 9. 2008, p. 290. ISBN: 9788578110796.
- [78] Hanna Terletska, Tianran Chen e Emanuel Gull. “Charge ordering and correlation effects in the extended Hubbard model”. Em: *Physical Review B* 95.11 (2017), pp. 1–11. ISSN: 24699969. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.115149.
-

-
- [79] D J Thouless. “Electrons in disordered systems and the theory of localization”. Em: *Physics Reports* 13.3 (1974), pp. 93–142. ISSN: 03701573. DOI: 10.1016/0370-1573(74)90029-5.
- [80] B Valenzuela e M A H Vozmediano. “Deformation of the fermi surface in the extended hubbard model”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 63.15 (2001), pp. 1–4. ISSN: 1550235X. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.153103.
- [81] E G C P Van Loon e M I Katsnelson. “The extended Hubbard model with attractive interactions”. Em: *Journal of Physics: Conference Series* 1136.1 (2018), pp. 0–9. ISSN: 17426596. DOI: 10.1088/1742-6596/1136/1/012006.
- [82] E G C P Van Loon et al. “Capturing nonlocal interaction effects in the Hubbard model: Optimal mappings and limits of applicability”. Em: *Physical Review B* 94.16 (2016), pp. 1–11. ISSN: 24699969. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.165141.
- [83] Julien Vidal et al. “Interaction induced delocalization for two particles in a periodic potential”. Em: *Physical Review Letters* 85.18 (2000), pp. 3906–3909. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.3906.
- [84] Gregory H Wannier. “Dynamics of Band Electrons in Electric and magnetic Fields”. Em: *Reviews of Modern Physics* 34.4 (1962), pp. 645–655. ISSN: 00368075. DOI: 10.1126/science.134.3483.915.
- [85] Gregory H Wannier. “Possibility of a Zener Effect”. Em: *Physical Review* (1955), p. 1227.
- [86] Gregory H Wannier. “Possibility of a zener effect”. Em: *Physical Review* 100.4 (1956), p. 1835. ISSN: 0031899X. DOI: 10.1103/PhysRev.100.1227.
- [87] Gregory H Wannier. “Wave functions and effective hamiltonian for bloch electrons in an electric field”. Em: *Physical Review* 117.2 (1960), pp. 432–439. ISSN: 0031899X. DOI: 10.1103/PhysRev.117.432.
- [88] Christian Waschke et al. “Coherent submillimeter-wave emission from Bloch oscillations in a semiconductor superlattice”. Em: *Physical Review Letters* 70.21 (1993), pp. 3319–3322. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.3319.
- [89] F Wegner. “Inverse participation ratio in $2+\epsilon$ dimensions”. Em: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter and Quanta* 36.3 (1980), pp. 209–214. ISSN: 14346036. DOI: 10.1007/BF01325284.
- [90] D Weinmann et al. “ $H/2e$ oscillations for correlated electron pairs in disordered mesoscopic rings”. Em: *Physical Review Letters* 75.8 (1995), pp. 1598–1601. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.1598.
- [91] J F Weisz e F Claro. “Pair formation in two-electron correlated chains”. Em: *Journal of Physics Condensed Matter* 15.19 (2003), pp. 3213–3216. ISSN: 09538984. DOI: 10.1088/0953-8984/15/19/321.
- [92] G Wiedemann e R Franz. “Ueber die wärme-leitungsfähigkeit der metalle.” Em: *Annalen der Physik* 165.4 (1866), pp. 497–531.

-
- [93] A H Wilson. “The theory of electronic semi-conductors”. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 133.822 (1931), pp. 458–491. ISSN: 0950-1207. DOI: 10.1098/rspa.1931.0162.
- [94] C. N. Yang. “Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction”. Em: *Physical Review Letters* 19.23 (1967), pp. 1312–1315.

Apêndice A

Demonstração do Teorema de Bloch

Para cada vetor da rede de Bravais \vec{R} definiremos um operador de translação $\hat{T}_{\vec{R}}$, atuando sobre uma função qualquer $f(\vec{r})$, de tal forma que o operador desloca a função por uma quantidade \vec{R} ,

$$\hat{T}_{\vec{R}}f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}). \quad (\text{A.1})$$

Como a hamiltoniana é periódica, tem-se

$$\hat{T}_{\vec{R}}H\psi = H(\vec{r} + \vec{R})\psi(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r})\psi(\vec{r} + \vec{R}) = H\hat{T}_{\vec{R}}\psi, \quad (\text{A.2})$$

uma vez que a equação acima vale para qualquer função ψ , temos a seguinte identidade

$$\hat{T}_{\vec{R}}H = H\hat{T}_{\vec{R}}. \quad (\text{A.3})$$

Além disso, o resultado de duas aplicações sucessivas não depende da ordem que é aplicada, uma vez que

$$\hat{T}_{\vec{R}}\hat{T}_{\vec{R}'}\psi(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{R}'}\hat{T}_{\vec{R}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}'), \quad (\text{A.4})$$

daí,

$$\hat{T}_{\vec{R}}\hat{T}_{\vec{R}'} = \hat{T}_{\vec{R}'}\hat{T}_{\vec{R}} = \hat{T}_{\vec{R}+\vec{R}'}. \quad (\text{A.5})$$

As equações A.3 e A.5, garantem que $\hat{T}_{\vec{R}}$, para qualquer vetor \vec{R} da rede de Bravais e a hamiltoniana H formam um conjunto de operadores que comutam entre si. A partir do teorema fundamental da mecânica quântica que os auto-estados de H podem ser escolhidos para serem simultaneamente auto-estados de todos os operadores $\hat{T}_{\vec{R}}$:

$$\begin{aligned} H\psi &= \varepsilon\psi \\ \hat{T}_{\vec{R}}\psi &= c(\vec{R})\psi. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Os autovalores $c(\vec{R})$ dos operadores de translação estão relacionados, devido a equação A.5,

$$\widehat{T}_{\vec{R}'}\widehat{T}_{\vec{R}}\psi = c(\vec{R})\widehat{T}_{\vec{R}'}\psi = c(\vec{R})c(\vec{R}')\psi, \quad (\text{A.7})$$

assim, temos

$$\widehat{T}_{\vec{R}'}\widehat{T}_{\vec{R}} = \widehat{T}_{\vec{R}+\vec{R}'}\psi = c(\vec{R} + \vec{R}'), \quad (\text{A.8})$$

segue que os autovalores deve satisfazer

$$c(\vec{R} + \vec{R}') = c(\vec{R})c(\vec{R}'). \quad (\text{A.9})$$

Agora, sejam \vec{a}_i com $i = 1, 2, 3$, os três vetores primitivos da rede de Bravais. Podemos escrever $c(\vec{a}_i)$ como

$$c(\vec{a}_i) = 2^{2i\pi x_i}, \quad (\text{A.10})$$

escolhendo convenientemente x_i . Segue das aplicações sucessivas de A.9, que se \vec{R} for um vetor geral da rede $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ temos

$$c(\vec{R}) = c(\vec{a}_1)^{n_1} + c(\vec{a}_2)^{n_2} + c(\vec{a}_3)^{n_3}, \quad (\text{A.11})$$

observe que A.11 é equivalente a escrever

$$c(\vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \quad (\text{A.12})$$

onde

$$\vec{k} = x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3 \quad (\text{A.13})$$

e os b_i são os vetores primitivos da rede recíproca, satisfazendo $a_i = 2\pi\delta_{i,j}$. Em resumo, mostramos que podemos escolher os auto-estados ψ de H tal que, para qualquer vetor \vec{R} , temos

$$\widehat{T}_{\vec{R}}\psi = \psi(\vec{r} + \vec{R}) = c(\vec{R})\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi(\vec{r}). \quad (\text{A.14})$$

Esta equação é o teorema de Bloch na forma 2.5.

Apêndice B

Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Bloch

Partindo da equação de Schrödinger, calcularemos o intervalo de energia permitido do elétron,

$$H|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle = E|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle, \quad (\text{B.1})$$

onde t_0 é fixo, dessa forma podemos decompor a função de onda $|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle$ como uma combinação linear dos orbitais atômicos $|n\rangle$ usando a representação de Wannier:

$$|\psi(\vec{r}, t_0)\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle, \quad (\text{B.2})$$

assim, B.1 torna-se

$$H \sum_n \phi_n |n\rangle = E \sum_n \phi_n |n\rangle. \quad (\text{B.3})$$

A hamiltoniana do que usaremos foi apresentado na equação 2.10. Substituindo 2.10 em B.3, obtemos

$$\begin{aligned} & \left[\varepsilon \sum_n |n\rangle\langle n| - J \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|) \right] \sum_n \phi_n |n\rangle = E \sum_n \phi_n |n\rangle. \\ & \sum_{n,n'} [\varepsilon \phi_n |n\rangle\langle n|n'\rangle - J(\phi_n |n\rangle\langle n+1|n'\rangle + \phi_n |n\rangle\langle n-1|n'\rangle)] = E \sum_{n'} \phi_n |n'\rangle. \end{aligned}$$

da condição de ortogonalidade do conjunto $\{|n\rangle\}$, $\langle n|n\rangle = \delta_{n,n'}$, e aplicando $\langle\psi|$, então teremos

$$\sum_{n,n'} [\varepsilon \phi_n |n\rangle\delta_{n,n'} - J(\phi_n |n\rangle\delta_{n+1,n'} + \phi_n |n\rangle\delta_{n-1,n'})] = E \sum_{n'} \phi_n^* \phi_n |n'\rangle.$$

$$\begin{aligned} \sum_{n,n'} [\varepsilon \phi_{n'}^* \phi_{n'} \langle n'|n \rangle - J \phi_{n'}^* (\phi_{n+1} \langle n'|n \rangle + \phi_{n-1} \langle n'|n \rangle)] &= E \sum_{n'} \phi_{n'}^* \phi_n \langle n'|n \rangle \\ \varepsilon \sum_n \phi_n^* \phi_n - J \sum_n \phi_n^* (\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) &= E \sum_n \phi_n^* \phi_n \\ \varepsilon \phi_n - J(\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) &= E \phi_n. \end{aligned} \tag{B.4}$$

Sabendo que podemos escrever as funções de Bloch como um serie de Fourier, já que são periódicas na rede recíproca, iremos expressar as amplitudes como $\phi_n = \phi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}}$, onde \vec{a} é o vetor unitário da rede,

$$\begin{aligned} E \phi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} &= \varepsilon \phi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} - J \phi_0 (e^{i\vec{k}(n+1)\vec{a}} + \phi_0 e^{i\vec{k}(n-1)\vec{a}}), \\ E \phi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} &= \varepsilon \phi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} - J \phi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} (e^{i\vec{k}\vec{a}} + e^{-i\vec{k}\vec{a}}), \\ E &= \varepsilon - 2J \cos(\vec{k}\vec{a}). \end{aligned} \tag{B.5}$$

Com isso, podemos ver que as energias permitidas estão dentro do intervalo $\varepsilon - 2J \leq E \leq \varepsilon + 2J$, dessa forma podemos ver que a banda de energia é deslocado por ε e a largura de energia depende de $4J$.

Apêndice C

Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Hubbard

Partindo da relação de recorrência encontrada resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo, equação 3.4, dada por

$$E\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} = (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow})\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} + J(\phi_{(n_\uparrow+1), n_\downarrow} + \phi_{(n_\uparrow-1), n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n_\downarrow+1)} + \phi_{n_\uparrow, (n_\downarrow-1)}). \quad (\text{C.1})$$

Considerando a seguinte transformada de coordenadas, relacionada com o centro de massa

$$\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} = e^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow), \quad (\text{C.2})$$

substituindo essa equação em C.1, temos

$$\begin{aligned} Ee^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow) &= J[e^{ik(n_\uparrow+1+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow + 1 - n_\downarrow) + e^{ik(n_\uparrow-1+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow - 1 - n_\downarrow) \\ &\quad + e^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow+1)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow + 1) + e^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow-1)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow - 1)] \\ &\quad + (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow})e^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow), \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{aligned} Ee^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow) &= Je^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow)a}[e^{ika}\varphi(n_\uparrow + 1 - n_\downarrow) + e^{-ika}\varphi(n_\uparrow - 1 - n_\downarrow) \\ &\quad + e^{ika}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow + 1) + e^{-ika}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow - 1)] \\ &\quad + (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow})e^{ik(n_\uparrow+n_\downarrow)a}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow), \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

com isso

$$\begin{aligned} E\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow) &= J[e^{ika}\varphi(n_\uparrow + 1 - n_\downarrow) + e^{-ika}\varphi(n_\uparrow - 1 - n_\downarrow) \\ &\quad + e^{ika}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow + 1) + e^{-ika}\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow - 1)] \\ &\quad + (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow})\varphi(n_\uparrow - n_\downarrow), \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

sendo $\vec{r} = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ a distancia entre os elétrons temos,

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= J[(e^{ika} + e^{-ika})\varphi(\vec{r} + 1) + (e^{ika} + e^{-ika})\varphi(\vec{r} - 1) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0})\varphi(\vec{r})], \\ &= J(e^{ika} + e^{-ika})(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}})\varphi(\vec{r}), \\ &= 2J\cos(ka)(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0})\varphi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Na ausência de interação, $U = 0$, temos $\varphi = e^{izra}$, dessa forma obtemos o intervalo de energia referentes a banda de estados não ligados,

$$\begin{aligned} Ee^{izra} &= 2J\cos(ka)(e^{iz(r+1)a} + e^{iz(r-1)a}) + 2\varepsilon e^{izra}, \\ &= 2J\cos(ka)e^{izra}(e^{iza} + e^{-iza}) + 2\varepsilon e^{izra}, \\ E &= 2J\cos(ka)\cos(za) + 2\varepsilon. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

de tal forma que a energia está dentro do intervalo $2\varepsilon - 4J \leq E \leq 2\varepsilon + 4J$. De modo analogo ao caso das energia de bloch, temos que a bande de estados ligados é deslocada em 2ε pela energia de acoplamento do elétrons ao o íon e sua largura é determinada pelo termo de *hopping*, $8J$, que é duas vez o valor obtido para apenas um elétron, com isso temos a soma da contribuição dos *hopping* dos dois elétrons.

Agora, para obtemos o intervalo de energia para a banda de estados ligados, voltaremos a equação C.6, e faremos $\vec{r} = 0$,

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= 2J\cos(ka)(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0})\varphi(\vec{r}), \\ &= 2J\cos(ka)(\varphi(1) + \varphi(-1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0})\varphi(0), \\ &= 4J\cos(ka)\varphi(1) + (2\varepsilon + U)\varphi(0) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

onde estamos assumindo que a função de onda é simétrica, isto é, $\varphi(\vec{r}) = \varphi(-\vec{r})$, considerando, também que $\varphi(\vec{r} + 1) = \lambda\varphi(\vec{r})$, logo

$$\begin{aligned} E\varphi(0) &= 4J\cos(ka)\lambda\varphi(0) + (2\varepsilon + U)\varphi(0), \\ \Rightarrow \lambda &= \frac{E - 2\varepsilon - U}{4J\cos(ka)}. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Fazendo agora para $\vec{r} = 1$, temos

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= 2J\cos(ka)(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0})\varphi(\vec{r}), \\ E\varphi(1) &= 2J\cos(ka)(\varphi(2) + \varphi(0)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0})\varphi(1), \\ E\lambda\varphi(0) &= 2J\cos(ka)(\lambda^2\varphi(0) + \varphi(0)) + 2\varepsilon\lambda\varphi(0) \\ E\lambda\varphi(0) &= 2J\cos(ka)(\lambda^2 + 1) + 2\varepsilon\lambda, \\ E\lambda &= 2J\cos(ka)(\lambda^2 + 1) + 2\varepsilon\lambda, \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

substituindo então o valor de λ , equação E.2, obtemos

$$E^2 - 2\varepsilon E - EU = 8J^2 \cos^2(ka) \left[\frac{E^2 - 2E(2\varepsilon + U) + (2\varepsilon + U)^2}{16J^2 \cos^2(ka)} + 1 \right] + 2\varepsilon E - 4\varepsilon^2 - 2\varepsilon U \quad (\text{C.11})$$

isolando os termo com E na expressão acima obtemos,

$$E^2 - 4\varepsilon E - 16J^2 \cos^2(ka) - U^2 + 4\varepsilon^2 = 0 \quad (\text{C.12})$$

resolvendo esse equação do sendo grau obtemos os seguintes valore de energia,

$$E = 2\varepsilon \pm \sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)} \quad (\text{C.13})$$

onde o \pm tem que ser igual a de U . Assim, temos que as energia dos estados ligados esta dentro de $2\varepsilon + U \leq E \leq 2\varepsilon + \sqrt{U^2 + 16J^2}$, no qual a energia de ligação do elétron ao íon ε desloca o banda de energia e sua largura é dada pelo termo de *hopping*.

Apêndice D

Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Hubbard Estendido

Considerando a hamiltoniano com o termo de interação entre primeiro vizinhos, mostrado na equação 4.1, dado por

$$H = \varepsilon \sum_{n=1}^N \sum_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + V \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow}]. \quad (\text{D.1})$$

Aplicando a função de onda eletrônica $|\psi\rangle$ na representação de Wannier (eq.3.2) na hamiltoniana, uma vez que estamos considerando os elétrons som *spins* oposto e distinguíveis espacialmente. De forma análoga, feito no caso do modelo de Hubbard, então

$$H_1|\psi\rangle = 2\varepsilon \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle,$$

$$H_2|\psi\rangle = J \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [| (n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + | (n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + | n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + | n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle],$$

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

agora para o quarto termo da hamiltoniana termos,

$$H_4|\psi\rangle = V \sum_{n=1}^N [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\uparrow}^\dagger c_{(n+1)\uparrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\uparrow}^\dagger c_{(n-1)\uparrow}] |\psi\rangle \quad (\text{D.2})$$

$$= V \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_n [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\uparrow}^\dagger c_{(n+1)\uparrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\uparrow}^\dagger c_{(n-1)\uparrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \quad (\text{D.3})$$

$$H_4|\psi\rangle = V \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle]. \quad (\text{D.4})$$

Assim, a hamiltoniana total é

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [(2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\ &+ J(|(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle) \\ &+ V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle)], \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

calculando o valor esperado obtemos,

$$\begin{aligned} \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | [(2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\ &+ J(|(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle) \\ &+ V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle)] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\ &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* [J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) \\ &+ [2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow})] \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}]. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Dá equação de Shrödinger independente do tempo, podemos calcular $\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|E|\psi\rangle$, então escrevendo na representação de Wannier

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

temos assim,

$$\begin{aligned} E \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* [J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) \\ &+ (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}))] \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}, \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

o que nos dá a seguinte relação de recorrência,

$$\begin{aligned} E\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} + J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \\ &\phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}). \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Fazendo $\langle\psi|i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle$, obtemos a relação de recorrência para o caso dinâmico,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) \\ &+ J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}(t)), \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Apêndice E

Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Hubbard Estendido

No apêndice D, chegamos em uma relação de recorrência para o modelo de Hubbard estendido em uma rede cristalina, dada por

$$E\phi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} = (2\varepsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} + V(\delta_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}}))\phi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} + J(\phi_{(n+1)_{\uparrow},n_{\downarrow}} + \phi_{(n-1)_{\uparrow},n_{\downarrow}} + \phi_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \phi_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}}). \quad (\text{E.1})$$

Assim, de maneira análoga feita no apêndice C, usaremos a transformada de coordenadas do centro de massa, dada por

$$\phi_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} = e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}), \quad (\text{E.2})$$

então ao substituírmos a E.2 em E.1, temos

$$Ee^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = J[e^{ik(n_{\uparrow}+1+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} + 1 - n_{\downarrow}) + e^{ik(n_{\uparrow}-1+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - 1 - n_{\downarrow}) + e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow}+1)a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + 1) + e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow}-1)a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} - 1)] + (2\varepsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}})e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \quad (\text{E.3})$$

$$+ V(\delta_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}})e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}), \quad (\text{E.4})$$

$$Ee^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = Je^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}[e^{ika}\varphi(n_{\uparrow} + 1 - n_{\downarrow}) + e^{-ika}\varphi(n_{\uparrow} - 1 - n_{\downarrow}) + e^{ika}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + 1) + e^{-ika}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} - 1)] + (2\varepsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} + V(\delta_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}}))e^{ik(n_{\uparrow}+n_{\downarrow})a}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}), \quad (\text{E.5})$$

com isso

$$E\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = J[e^{ika}\varphi(n_{\uparrow} + 1 - n_{\downarrow}) + e^{-ika}\varphi(n_{\uparrow} - 1 - n_{\downarrow}) + e^{ika}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + 1) + e^{-ika}\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow} - 1)] + (2\varepsilon + U\delta_{n_{\uparrow},n_{\downarrow}} + V(\delta_{n_{\uparrow},(n+1)_{\downarrow}} + \delta_{n_{\uparrow},(n-1)_{\downarrow}}))\varphi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}), \quad (\text{E.6})$$

sendo $\vec{r} = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ a distancia entre os elétrons temos,

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= J[(e^{ika} + e^{-ika})\varphi(\vec{r} + 1) + (e^{ika} + e^{-ika})\varphi(\vec{r} - 1) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(\vec{r})], \\ &= J(e^{ika} + e^{-ika})(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(\vec{r}), \\ &= 2J\cos(ka)(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Na ausência de interação local e não-local, $U = V = 0$, temos $\varphi = e^{izr}$, dessa forma obtemos o intervalo de energia referentes a banda de estados não ligados,

$$\begin{aligned} Ee^{izr} &= 2J\cos(ka)(e^{iz(r+1)a} + e^{iz(r-1)a}) + 2\varepsilon e^{izr}, \\ &= 2J\cos(ka)e^{izr}(e^{iza} + e^{-iza}) + 2\varepsilon e^{izr}, \\ E &= 2J\cos(ka)\cos(za) + 2\varepsilon. \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

de tal forma que a energia está dentro do intervalo $2\varepsilon - 4J \leq E \leq 2\varepsilon + 4J$, exatamente como obtemos no apêndice C.

Agora, para obtemos o intervalo de energia para a banda de estados ligados, voltaremos a equação E.7, e faremos $\vec{r} = 0$,

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= 2J\cos(ka)(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(\vec{r}), \\ &= 2J\cos(ka)(\varphi(1) + \varphi(-1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(0), \\ &= 4J\cos(ka)\varphi(1) + (2\varepsilon + U)\varphi(0) \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

onde estamos assumindo que a função de onda é simétrica, isto é, $\varphi(\vec{r}) = \varphi(-\vec{r})$, considerando, também que $\varphi(\vec{r} + 1) = \lambda\varphi(\vec{r})$, logo

$$\begin{aligned} E\varphi(0) &= 4J\cos(ka)\lambda\varphi(0) + (2\varepsilon + U)\varphi(0), \\ \Rightarrow \lambda &= \frac{E - 2\varepsilon - U}{4J\cos(ka)}. \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Exatamente como mostrado no apêndice C, uma vez que em $\vec{r} = 0$ não temos contribuição da interação entre primeiros vizinhos.

Fazendo agora para $\vec{r} = 1$, temos

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= 2J\cos(ka)(\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(\vec{r}), \\ E\varphi(1) &= 2J\cos(ka)(\varphi(2) + \varphi(0)) + (2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1}))\varphi(1), \\ E\lambda\varphi(0) &= 2J\cos(ka)(\lambda^2\varphi(0) + \varphi(0)) + (2\varepsilon + V)\lambda\varphi(0) \\ E\lambda\varphi(0) &= 2J\cos(ka)(\lambda^2 + 1) + (2\varepsilon + V)\lambda, \\ E\lambda &= 2J\cos(ka)(\lambda^2 + 1) + (2\varepsilon + V)\lambda, \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

substituindo então o valor de λ , equação E.10, obtemos

$$E^2 - 2\varepsilon E - EU = 8J^2\cos^2(ka) \left[\frac{E^2 - 2E(2\varepsilon + U) + (2\varepsilon + U)^2}{16J^2\cos^2(ka)} + 1 \right] + 2\varepsilon E + VE - 4\varepsilon^2 - 2\varepsilon U - 2\varepsilon V - VU \quad (\text{E.12})$$

fazendo algumas manipulações algébricas para isolar E na expressão acima obtemos,

$$E^2 - 2(2\varepsilon + V)E - U^2 + 4\varepsilon^2 + 2V(2\varepsilon + U) - 16J^2 \cos^2(ka) = 0, \quad (\text{E.13})$$

resolvendo esse equação do sendo grau obtemos os seguintes valores de energia,

$$E = 2\varepsilon + V \pm \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2 \cos^2(ka)} \quad (\text{E.14})$$

onde o \pm tem que ser igual a de U , então, considerando $U > 0$, temos que as energias dos estados ligados estão dentro de $2\varepsilon + U \leq E \leq 2\varepsilon + V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$, no qual a energia de ligação do elétron ao íon ε desloca a banda de energia e sua largura é dada pelo termo de *hopping*.

Já para descobrirmos o intervalo de energia referente aos estados ligados associados à interação não-local. Consideraremos a paridade ímpar da função de onda, isto é, $\varphi(-\vec{r}) = -\varphi(\vec{r})$, usaremos também $\varphi(\vec{r} + 1) = \lambda\varphi(\vec{r})$. Assim, para $\vec{r} = 1$,

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= 2J\cos(ka)[\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)] + [2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1})] \\ &= 2J\cos(ka)\lambda\varphi(1) + (2\varepsilon + V)\varphi(1) \\ &= 2J\lambda\cos(ka) + 2\varepsilon + V \\ \Rightarrow \lambda &= \frac{E - 2\varepsilon - V}{2J\cos(ka)} \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

Agora, para a equação $\vec{r} = 2$, temos

$$\begin{aligned} E\varphi(\vec{r}) &= 2J\cos(ka)[\varphi(\vec{r} + 1) + \varphi(\vec{r} - 1)] + [2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1})]\varphi(\vec{r}) \\ E\varphi(2) &= 2J\cos(ka)[\varphi(3) + \varphi(1)] + [2\varepsilon + U\delta_{\vec{r},0} + V(\delta_{\vec{r},1} + \delta_{\vec{r},-1})]\varphi(2) \\ E\lambda\varphi(1) &= 2J\cos(ka)[\lambda^2\varphi(1) + \varphi(1)] + 2\varepsilon\lambda\varphi(1) \\ E\lambda &= 2J\cos(ka)(\lambda^2 + 1) + 2\varepsilon\lambda \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

substituindo E.15 em E.16 e fazendo algumas manipulações, obtemos

$$E^2 - E(2\varepsilon + V) = (E - 2\varepsilon - V)^2 + 4J^2 \cos^2(ka) + 2\varepsilon E - 4\varepsilon^2 - 2V\varepsilon, \quad (\text{E.17})$$

com isso conseguimos escrever E como,

$$E = 2\varepsilon + V + \frac{4J^2 \cos^2(ka)}{V}. \quad (\text{E.18})$$

Portanto, o intervalo de energia da banda de estados ligados referente à interação não-local está dentro do intervalo $2\varepsilon + V \leq E \leq 2\varepsilon + V + 4J^2/V$. Vemos mais uma vez o papel de ε no deslocamento da banda e alargamento da banda associado ao termo de *hopping*.

Apêndice F

Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Hubbard com Campo Elétrico

Considerando a hamiltoniana com a presença de um campo elétrico constante é dada por

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_s (\varepsilon + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s}$$

Aplicando a função de onda eletrônica $|\psi\rangle$ na representação de Wannier (eq.3.2) na hamiltoniana, uma vez que estamos considerando os elétrons com *spins* oposto e distinguíveis espacialmente. De forma análoga, feito no caso do modelo de Hubbard, então

$$H|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_s (\varepsilon + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] |\psi\rangle + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle,$$

com isso, H_1 ,

$$\begin{aligned} H_1|\psi\rangle &= \sum_{n=1}^N \sum_s (\varepsilon + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle \\ &= \sum_{n=1}^N [(\varepsilon + eF a n_\uparrow) c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + (\varepsilon + eF a n_\downarrow) c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow}] \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\ &= \sum_{n=1}^N \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [(\varepsilon + eF a n_\uparrow) c_{n_\uparrow}^\dagger c_{n_\uparrow} + (\varepsilon + eF a n_\downarrow) c_{n_\downarrow}^\dagger c_{n_\downarrow}] |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\ &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (2\varepsilon + eF a (n_\uparrow + n_\downarrow)) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \end{aligned}$$

para H_2

$$\begin{aligned}
 H_2|\psi\rangle &= J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)s}^\dagger c_{n_s}] |\psi\rangle, \\
 &= J \sum_{n=1}^N [c_{(n+1)\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} + c_{(n-1)\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow}] + [c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} + c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow}] \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} |n\uparrow, n\downarrow\rangle, \\
 &= J \sum_{n=1}^N \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} \left\{ [c_{(n+1)\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} + c_{(n-1)\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow}] + [c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} + c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow}] \right\} |n\uparrow, n\downarrow\rangle, \\
 &= J \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} \{ |(n+1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |(n-1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle \},
 \end{aligned}$$

por fim, para H_3

$$\begin{aligned}
 H_3|\psi\rangle &= U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} |\psi\rangle, \\
 &= U \sum_{n=1}^N c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} |n\uparrow, n\downarrow\rangle, \\
 &= U \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} \sum_{n=1}^N c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} |n\uparrow, n\downarrow\rangle, \\
 &= \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} U \delta_{n\uparrow, n\downarrow} |n\uparrow, n\downarrow\rangle.
 \end{aligned}$$

Dessa forma obtemos,

$$\begin{aligned}
 H|\psi\rangle &= \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} (2\varepsilon + U\delta_{n\uparrow, n\downarrow} + eFa(n\uparrow + n\downarrow)) |n\uparrow, n\downarrow\rangle \\
 &\quad + J[|(n+1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |(n-1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle]
 \end{aligned}$$

assim, o valor esperado, $\langle\psi|H|\psi\rangle$, será

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \sum_{n'\uparrow, n'\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n'\uparrow, n'\downarrow}^* \langle n'\uparrow, n'\downarrow | [(2\varepsilon + U\delta_{n\uparrow, n\downarrow} + eFa(n\uparrow + n\downarrow)) |n\uparrow, n\downarrow\rangle \\
 &\quad + J(|(n+1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |(n-1)\uparrow, n\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n+1)\downarrow\rangle + |n\uparrow, (n-1)\downarrow\rangle]
 \end{aligned}$$

tal que obtemos,

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n\uparrow, n\downarrow} \phi_{n\uparrow, n\downarrow}^* [(2\varepsilon + U\delta_{n\uparrow, n\downarrow} + eFa(n\uparrow + n\downarrow)) \phi_{n\uparrow, n\downarrow} + J(\phi_{(n+1)\uparrow, n\downarrow} + \phi_{(n-1)\uparrow, n\downarrow} \\
 &\quad + \phi_{n\uparrow, (n+1)\downarrow} + \phi_{n\uparrow, (n-1)\downarrow})].
 \end{aligned} \tag{F.1}$$

A partir da equação de schrödinger independente do tempo, temos que o valor esperado 2.11, teremos que o valore esperado, $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle$, na representação de Wannier,

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

portanto, a relação de recorrência para a energia é

$$\begin{aligned} E\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \\ &\quad + J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}). \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

De maneira análoga, a partir da equação de Schrödinger dependente do temos, $\langle \psi | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$, obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) \\ &\quad + J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}(t)). \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Apêndice G

Demonstração da Relação de Recorrência do Hamiltoniano Hubbard Estendido com Campo Elétrico

Considerando a hamiltoniano com o termo de interação entre primeiro vizinhos, mostrado na equação 4.1, dado por

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{n=1}^N \sum_s (\varepsilon + eF a n_s) c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + J \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{(n+1)_s}^\dagger c_{n_s} + c_{(n-1)_s}^\dagger c_{n_s}] + U \sum_{n=1}^N \prod_s c_{n_s}^\dagger c_{n_s} + \\
 V \sum_{n=1}^N \sum_s [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n+1)\downarrow}^\dagger c_{(n+1)\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{(n-1)\downarrow}^\dagger c_{(n-1)\downarrow}].
 \end{aligned}
 \tag{G.1}$$

Aplicando a função de onda eletrônica $|\psi\rangle$ na representação de Wannier (eq.3.2) na hamiltoniana, uma vez que estamos considerando os elétrons com *spins* oposto e distinguíveis espacialmente. De forma análoga, feito no caso do modelo de Hubbard, então

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} (2\varepsilon + eF a (n_\uparrow + n_\downarrow)) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\
 H_2|\psi\rangle &= J \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [|(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle], \\
 H_3|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} U \delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\
 H_4|\psi\rangle &= V \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow} |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle].
 \end{aligned}$$

Assim, a hamiltoniana total é

$$\begin{aligned}
 H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} [(2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))|n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
 &\quad + J(|(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle) \\
 &\quad + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}|n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}|n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle)], \tag{G.2}
 \end{aligned}$$

calculando o valor esperado obtemos,

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \sum_{n'_\uparrow, n'_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n'_\uparrow, n'_\downarrow}^* \langle n'_\uparrow, n'_\downarrow | [(2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))|n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
 &\quad + J(|(n+1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |(n-1)_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle) \\
 &\quad + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}|n_\uparrow, (n+1)_\downarrow\rangle + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}|n_\uparrow, (n-1)_\downarrow\rangle) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle, \\
 &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* [J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) \\
 &\quad + [2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow)]\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}]. \tag{G.3}
 \end{aligned}$$

Dá equação de Shrödinger independente do tempo, podemos calcular $\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|E|\psi\rangle$, então escrevendo na representação de Wannier

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

temos assim,

$$\begin{aligned}
 E \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= \sum_{n_\uparrow, n_\downarrow} \phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}^* [J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) \\
 &\quad + (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow},
 \end{aligned}$$

o que nos dá a seguinte relação de recorrência,

$$\begin{aligned}
 E\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} + J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow} + \\
 &\quad \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}). \tag{G.4}
 \end{aligned}$$

Fazendo $\langle\psi|i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle$, obtemos a relação de recorrência para o caso dinâmico,

$$\begin{aligned}
 i\hbar\frac{d}{dt}\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow} &= (2\varepsilon + U\delta_{n_\uparrow, n_\downarrow} + V(\delta_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow} + \delta_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}) + eFa(n_\uparrow + n_\downarrow))\phi_{n_\uparrow, n_\downarrow}(t) \\
 &\quad + J(\phi_{(n+1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{(n-1)_\uparrow, n_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n+1)_\downarrow}(t) + \phi_{n_\uparrow, (n-1)_\downarrow}(t)), \tag{G.5}
 \end{aligned}$$