

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

ANTHONY SALES PEIXOTO

Dois Elétrons Interagentes em Cadeias Aperiódicas

Maceió – Brasil
Julho de 2014

ANTHONY SALES PEIXOTO

Dois Elétrons Interagentes em Cadeias Aperiódicas

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

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

Coorientador: Prof. Dr. Wandearley da
Silva Dias

Maceió – Brasil
Julho de 2014

Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecário: Roselito de Oliveira Santos

P379d Peixoto, Anthony Sales.
Dois elétrons interagentes em cadeias aperiódicas /Anthony Sales Peixoto.
– Maceió, 2014.
43 f. il.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Co-orientador: Wandearley da Silva Dias
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas.
Instituto de Física. Programa de Pós Graduação em Física da matéria
condensada. Maceió, 2014.

Bibliografia: f. 42-43.

1. Elétrons interagentes. 2. Elétron-elétron. 3. Transporte eletrônico.
4. Cadeias aperiódicas. I. Título.

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

“Dois Elétrons Interagentes em Cadeias Aperiódicas”

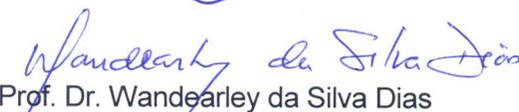
por

Anthony Sales Peixoto

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Wandearley da Silva Dias (co-orientador), Vinícius Manzoni Vieira, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Carlos Argolo Pereira Alves, do Instituto Federal de Alagoas, consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 7 de agosto de 2014


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias


Prof. Dr. Vinícius Manzoni Vieira


Prof. Dr. Carlos Argolo Pereira Alves

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

AGRADECIMENTOS

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

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

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

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

A CAPES, pelo apoio financeiro.

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

RESUMO

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

Palavras-chave: 1. Elétrons interagentes. 2. Elétron-elétron. 3. Transporte eletrônico. 4. Cadeias aperiódicas.

ABSTRACT

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

Keywords: 1. Interacting electrons. 2. Electron-electron. 3. Electronic transport. 4. Aperiodics chains.

SUMÁRIO

1	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	8
1.1	O Modelo de Elétrons Livres e Teoria de Bandas de Energia	9
1.2	O Modelo de Bloch	11
1.3	O Modelo de Anderson	14
1.3.1	Teoria de escala do modelo de Anderson	17
1.4	Dois Elétrons Interagentes em Redes Unidimensionais	19
1.4.1	O modelo de Anderson-Hubbard em redes unidimensionais com desordem	21
1.5	Aperiodicidade na Distribuição de Potenciais	25
2	DOIS ELÉTRONS INTERAGENTES EM UMA REDE APERIÓDICA UNIDIMENSIONAL	27
2.1	Potenciais Aperiódicos: Efeitos de Correlação	27
2.2	Resultados: Aspectos Estacionários	30
2.3	Resultados: Aspectos Dinâmicos	32
2.3.1	Oscilações de Bloch: efeitos do campo local	34
3	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	40
	REFERÊNCIAS	42

1

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A condução elétrica nos metais vem sendo um grande objeto de estudo na comunidade científica, principalmente na área da Física da Matéria Condensada. Contudo, nem todos os sólidos na natureza apresentam comportamento metálico. Isso tem motivado diversos estudos [1, 2, 3, 4] para formular modelos que tentam explicar a condução de elétrons nos sólidos.

Ainda no final do século XIX, quando a Física Moderna não estava bem desenvolvida, Paul K. Drude e Arnold J.W. Sommerfeld propuseram modelos baseados na teoria cinética dos gases [5, 6], tratando os elétrons como partículas. Nesses modelos, os íons são como esferas maciças fixas, idênticas e não interagentes entre si, enquanto que os elétrons não interagem entre si, movendo-se livremente no sólido e colidindo contra os íons. Primeiramente Drude aplicou a distribuição de Maxwell-Boltzmann para obter a velocidade média dos elétrons e, a partir disso, a condutividade elétrica. Posteriormente Sommerfeld levou em consideração que os elétrons obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, aplicando a distribuição de Fermi-Dirac na obtenção da velocidade média. Ambos encontraram uma relação onde a condutância elétrica σ é inversamente proporcional à temperatura. Embora a condutância encontrada em ambos os modelos concordasse com a teoria, os resultados obtidos divergiam dos valores encontrados experimentalmente para os metais. Além disso, esses modelos não conseguem explicar o comportamento isolante que certos materiais apresentam.

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

Neste capítulo serão abordados alguns modelos que tentam descrever o fenômeno de condução. Também será apresentado o formalismo físico e matemático do modelo de Anderson-Hubbard, o qual foi adotado em nosso estudo.

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

No início do século XX começaram a ser desenvolvidas teorias quânticas de condução elétrica. Essas novas teorias empregam o conceito de *bandas de energia*, que leva em conta o modelo atômico proposto por Niels Bohr, em 1912. Segundo Bohr, os elétrons se movem ao redor do núcleo atômico em órbitas circulares. Cada órbita só permite elétrons com determinados valores de energia mecânica total, denominados *níveis de energia* [7, 8].

Os níveis de energia podem ser obtidos resolvendo o Modelo de Elétrons Livres. Esse modelo leva em conta a função de onda eletrônica e que os elétrons só possuem energia cinética. Assim, no caso unidimensional, o modelo se assemelha ao problema de um elétron de massa m confinado em um poço de potencial de largura L , cujo Hamiltoniano é descrito como:

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

onde o potencial $V(x)$ é descrito segundo a expressão:

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

Portanto, resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo (eq. 1.1) para $V(x) = 0$, temos:

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

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

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

Aplicando as condições de contorno do problema, $\psi(0) = 0$ e $\psi(L_x) = 0$, na equação 1.3 obtemos:

$$\begin{aligned} \psi(0) &= A + B = 0 \\ \psi(L_x) &= i(A - B) \operatorname{sen}(kL_x) = 0 \\ \operatorname{sen}(kL_x) &= \operatorname{sen}(n_x \pi) = 0, \text{ com } n = 0, 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (1.4)$$

Assim, sendo $k = \frac{n_x \pi}{L_x}$, a energia é:

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

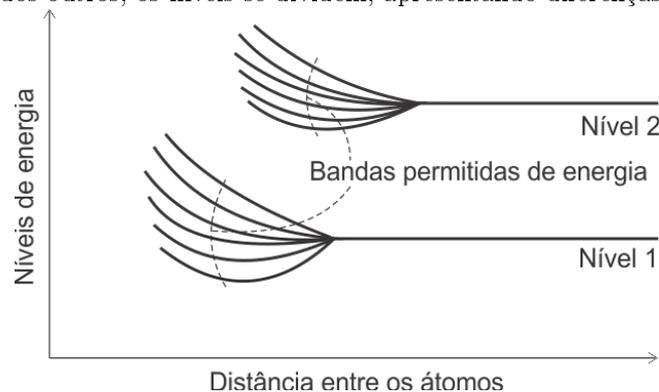
Analogamente, resolvendo o problema para três dimensões obtemos:

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

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

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

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

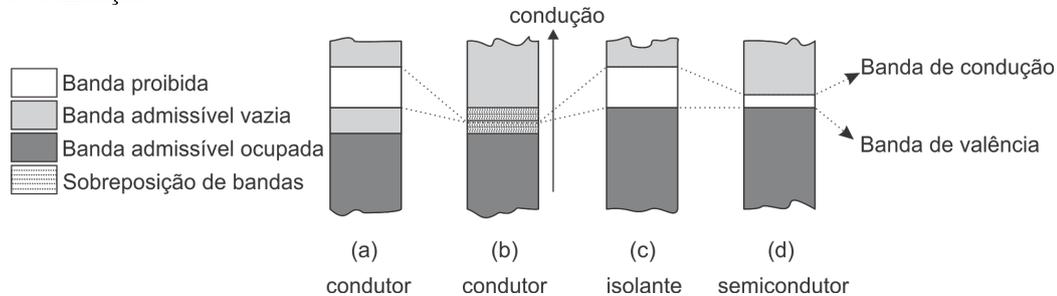


Fonte: Tipler (2006) [8].

energia mais baixas são ocupadas pelos elétrons ligados ao núcleo atômico. As bandas mais energéticas, que contêm os elétrons que participam da condução, são as *bandas de valência*. A banda de valência pode estar totalmente, ou parcialmente, preenchida com elétrons, dependendo do tipo de material. As bandas mais baixas onde existem estados não ocupados são chamadas de *bandas de condução*. Além disso, existem valores de energia proibidos aos elétrons, formando lacunas que separam as bandas. Essas lacunas resultam da interação entre as funções de onda eletrônica e os núcleos, sendo chamadas de *bandas proibidas de energia*, ou *energy gaps*.

O estudo das bandas de energia é muito importante na compreensão do fenômeno de condução. A estrutura das bandas se apresentam de forma diferente para condutores, semicondutores e isolantes, como mostrado na figura 1.2. Com uma análise mais detalhada do modelo do elétron livre sob a ação de barreiras de potencial é possível compreender

Figura 1.2: Bandas de energia de condutores, isolantes e semicondutores. (a) A banda de valência do condutor está parcialmente preenchida, de modo que os elétrons são excitados mais facilmente, saltando para a banda de estados vizinha. (b) Neste condutor as bandas admissíveis estão sobrepostas. (c) Nos isolantes existe uma lacuna muito grande separando a banda de valência e a banda de condução. (d) Nos semicondutores a banda proibida é estreita, sendo possível excitar elétrons fazendo-os saltarem para a banda de condução.



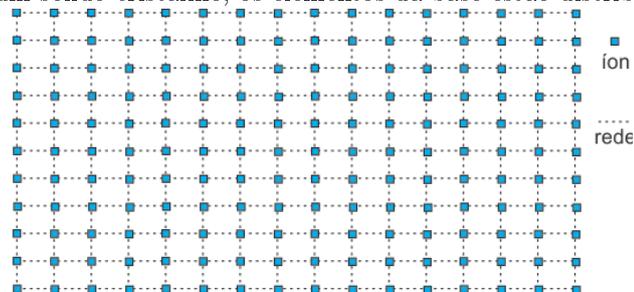
Fonte: Tipler (2006) [8].

melhor a diferença entre condutores e isolantes. Além disso, a estrutura dos sólidos também contribui com essa diferença. Com base nisso, novos modelos foram desenvolvidos levando em conta essas características, como o *Modelo de Bloch* [4], para sólidos perfeitamente cristalinos, e o *Modelo de Anderson* [1], para materiais que apresentam algum tipo de impureza em sua estrutura. Veremos agora os principais aspectos destes modelos.

1.2 O Modelo de Bloch

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

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



Fonte: Autor (2014).

infinita desse padrão forma a *rede de Bravais* [7], onde a posição de cada sítio (elemento

da base), em uma rede tridimensional, pode ser representada por:

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

onde n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros e \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 são chamados de *vetores primitivos*. O vetor primitivo é o espaçamento da rede e equivale à distância entre dois elementos da base em uma direção.

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

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

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

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

Portanto, ao considerarmos uma onda eletrônica se propagando em uma rede, ao encontrar uma barreira de potencial ela será parcialmente refletida e parcialmente transmitida. Quando uma segunda barreira é colocada, uma parte da função de onda fica refletindo na região entre as barreiras. Esse fenômeno é conhecido como *reflexões de Bragg*. Como em um cristal puro a base é uniforme (todos os elementos são iguais), as barreiras são idênticas, de modo que a onda assume um padrão estacionário. Esse padrão é formado devido às interferências construtivas e destrutivas causadas pelas reflexões. Logo, podemos representar a função de onda como um arranjo simétrico e antissimétrico, que no caso unidimensional temos:

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

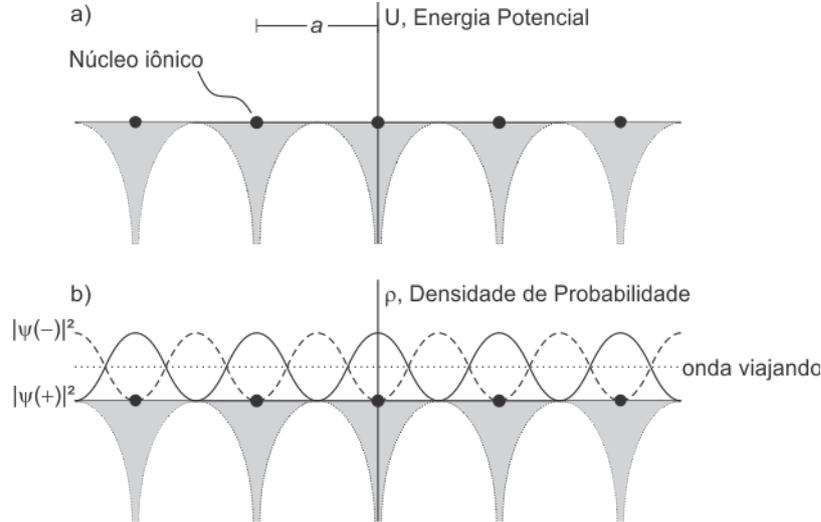
$$\psi(-) = \exp\left(\frac{i\pi x}{a}\right) - \exp\left(-\frac{i\pi x}{a}\right) = 2i \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (1.11)$$

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

Baseado na fenomenologia apresentada até agora, Felix Bloch [4] desenvolveu um modelo onde é possível obter os estados eletrônicos em redes cristalinas. No modelo de Bloch o Hamiltoniano é escrito como:

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

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



Fonte: Kittel (1996) [6].

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

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

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

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

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

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

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

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

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

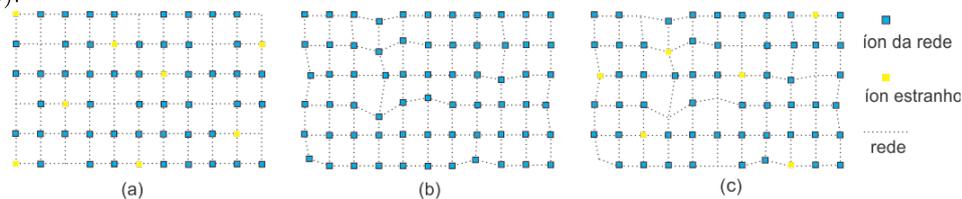
As autofunções da equação de onda para um potencial periódico são o produto de uma onda plana $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ vezes uma função $u_k(\vec{r})$, que apresenta a mesma periodicidade da rede cristalina.

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

1.3 O Modelo de Anderson

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

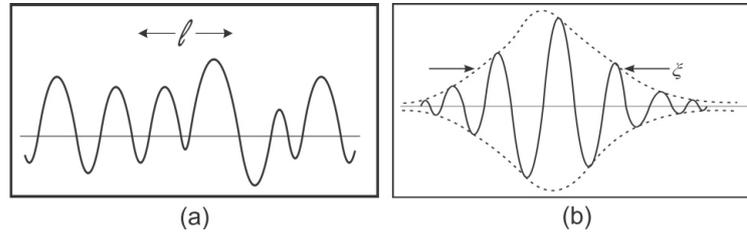
Figura 1.5: Defeitos encontrados na rede. Em (a) são encontrados íons estranhos ou alguns elementos estão ausentes. Em (b) a rede apresenta irregularidades espaciais. Em (c) é mostrada uma combinação de (a) e (b).



Fonte: Autor (2014).

ao tipo de desordem, causando alterações nas reflexões sofridas pela onda eletrônica entre as barreiras. Devido a isso, ocorrem interferências construtivas e destrutivas, resultando em uma incoerência de fase, formando um padrão específico da função de onda em uma região finita da rede. Esse fenômeno é conhecido como *localização da função de onda* [9, 10]. Nesse caso, os auto-estados se concentram em uma determinada região do sólido, sendo desprezíveis em qualquer outra. Dizemos então que os estados são *localizados*. A figura 1.6 mostra o padrão típico para funções de onda estendidas (1.6a) e funções de onda localizadas (1.6b). No trabalho de Lee e Ramakrishnan [11] é mostrado que a

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



Fonte: P.A. Lee (1985) [11].

probabilidade de encontrar o elétron decai exponencialmente com a distância, conforme a expressão 1.17 que mostra o caso unidimensional, onde ξ é o comprimento de localização e x é a posição do elétron.

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

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

Embora o modelo de Bloch conseguisse explicar a condução nos sólidos perfeitamente cristalinos, ele falha por não prever o fenômeno de localização em materiais que apresentam algum grau de desordem. Assim, no final da década de 1950 um novo modelo, proposto por Paul W. Anderson [1], estudou os sistemas desordenados, permitindo uma descrição dos estados localizados e de sua dinâmica através de saltos quânticos dos elétrons entre os sítios da rede. Em seu modelo, Anderson considera apenas um termo cinético e um termo potencial, cujo Hamiltoniano é, no formalismo de segunda quantização, escrito como:

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

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

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

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

Expandindo os auto-estados nas bases dos orbitais atômicos, $\psi = \sum_i f_i \phi_i$, com i representando um sítio (uma posição na rede), ϕ_i é o orbital no sítio i e f_i é a probabilidade associada a ocupação do sítio, obtemos:

$$E \sum_i f_i \phi_i = \sum_i \bar{\epsilon}_i c_i^\dagger c_i f_i \phi_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j f_j \phi_i \quad (1.20)$$

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

$$E f_i = \bar{\epsilon}_i f_i + t(f_{i-1} + f_{i+1}) \quad (1.21)$$

Usando as grandezas adimensionais na equação 1.21 obtemos:

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

Logo, podemos reescrever a equação de Schrödinger como:

$$\varepsilon f_i = \epsilon_i f_i + f_{i-1} + f_{i+1} \quad (1.23)$$

com ϵ_i sendo a energia do sítio na posição i e com f_{i-1} e f_{i+1} sendo a probabilidade do elétron saltar entre os sítios vizinhos. Além disso, podemos representar o Hamiltoniano na forma matricial, que para o caso unidimensional de uma rede com N sítios, é:

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

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

Para obter informações da dinâmica do sistema, devemos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo. Aplicando novamente a expansão na base dos orbitais atômicos para o caso unidimensional, temos:

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

Na equação 1.25 o n representa o sítio (substituindo o i utilizado nas equações anteriores para representar o sítio). Novamente usando a grandeza adimensional $\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{t}$ obtemos:

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

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

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

1.3.1 Teoria de escala do modelo de Anderson

A partir da publicação de Anderson, um estudo realizado em 1974 por David J. Thouless [12] propôs um parâmetro capaz de controlar a transição do estado estendido para o estado localizado em $T = 0$.

Posteriormente, em 1979 por Abrahams e colaboradores [13] descreve o parâmetro como sendo uma *condutância generalizada* g , onde é mostrada uma dependência da transição de Anderson com o tamanho da rede. Para isso Abrahams e colaboradores reformularam o modelo de Anderson, descrevendo um sólido de d dimensões como um arranjo de várias caixas, com volume L^d contendo vários sítios, ao invés de sítios distribuídos na rede. A condutância generalizada é definida como:

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

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

Pelo princípio de incerteza, se estabelece que:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.35)$$

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

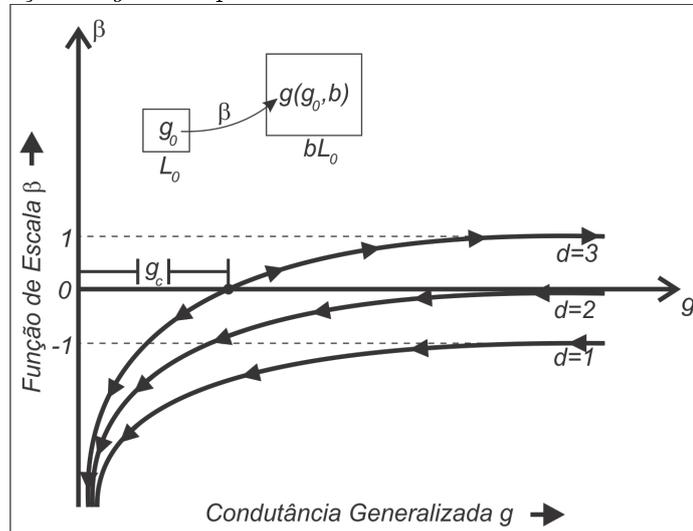
O comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ é obtido a partir do comportamento assintótico de g , tomando os limites $g \rightarrow 0$ e $g \rightarrow \infty$. Dessa forma, das equações 1.33 e 1.35, temos:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2 \quad (1.36)$$

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g \quad (1.37)$$

Portanto, com base no comportamento de $\beta(g)$ (ver equação 1.35) mostrado na figura 1.7, podemos concluir que:

Figura 1.7: Comportamento qualitativo da função de escala $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala. O gráfico nos mostra a relação de β versus g . Apenas no caso tridimensional ($d = 3$) o sistema apresenta uma transição do estado estendido para o estado localizado. A setas sobre as curvas indicam a direção de g varia quando L cresce.



Fonte: Abrahams *et al* (1979) [13].

- $\beta > 0$: g cresce com o aumento de L , caracterizando um comportamento metálico.
- $\beta \leq 0$: g diminui com o aumento de L , caracterizando um comportamento isolante. Podemos observar que para g muito pequeno, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$. Segundo a teoria de Anderson, isso demonstra que há um fraco acoplamento entre as caixas e uma desordem forte, de modo que os estados eletrônicos são localizados e decaem exponencialmente com a distância.

Além disso, existe um ponto crítico no diagrama de fluxo, g_c , chamado de *ponto fixo instável*, quando $\beta = 0$. Observando a figura 1.7, vemos que há uma dependência da Transição de Anderson com a dimensão: apenas para $d = 3$ existe a transição metal-isolante, tendo um comportamento metálico, se $g > g_c$, ou isolante, se $g < g_c$. Nos casos unidimensional e bidimensional (respectivamente $d = 1$ e $d = 2$) apenas apresentam comportamento isolante.

1.4 Dois Elétrons Interagentes em Redes Unidimensionais

O modelo proposto por Anderson no final da década de 50 consegue prever o comportamento isolante para sólidos desordenados. Contudo, Anderson desconsiderava a interação entre os elétrons da rede, não sendo capaz de explicar a condução elétrica em certos tipos de materiais tipicamente isolantes. Assim, em 1949, Nevill F. Mott [2]

publicou um trabalho onde foi discutido o problema do óxido de níquel. Nesse trabalho, Mott mostra que o óxido de níquel apresenta uma estrutura cúbica e, embora ele seja isolante no estado puro, apresenta também um comportamento condutor, de acordo com os modelos anteriores, necessitando de mais investigação. Posteriormente, em 1968, Mott [14] descreve uma transição metal/isolante, conhecida como *transição de Mott*, considerando os efeitos da interação Coulombiana entre os elétrons da rede.

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

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{12}} \right) \quad (1.38)$$

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

Para compreender como os dois elétrons podem ocupar o mesmo sítio, devemos analisar este fenômeno sob o ponto de vista da Mecânica Quântica. Como sabemos, os elétrons tem natureza dual, se comportando como ondas e como partículas. Além disso, como os elétrons são férmions, eles não podem ocupar o mesmo estado quântico e, com isso, suas autofunções são totalmente antissimétricas sobre a troca de quaisquer duas partículas [15], ou seja, temos o *Postulado de Simetrização*:

$$P_{ij} |\text{N férmions idênticos}\rangle = - |\text{N férmions idênticos}\rangle \quad (1.39)$$

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

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \chi(m_{s1}, m_{s2}) \quad (1.40)$$

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

Se os elétrons forem distinguíveis por spin, como nos trabalhos de Brito [16] e Römer [17], podemos reescrever a parte espacial da função de onda, de modo que a probabilidade de encontrar o elétron 1 em d^3x_1 em torno de \mathbf{x}_1 e o elétron 2 em d^3x_2 em torno de \mathbf{x}_2 , independente do spin, é:

$$|\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 = |\omega_A(x_1)|^2 |\omega_B(x_2)|^2 \quad (1.41)$$

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

$$|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1,\uparrow}} \sum_{n_{2,\downarrow}} f_{n_{1,\uparrow}, n_{2,\downarrow}} c_{n_{1,\uparrow}}^\dagger c_{n_{2,\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle \quad (1.42)$$

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

Com base nesses conceitos, John Hubbard [3] propôs um modelo onde a interação entre os elétrons é levada em conta. Dessa forma, ele descreve o hamiltoniano do sistema em termos da energia cinética t dos elétrons e da interação coulombiana U entre eles, sendo expresso no formalismo de segunda quantização por:

$$H = -t \sum_{i,j} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \right) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1.43)$$

A maioria dos modelos abordados despreza os efeitos da interação entre os elétrons da rede. Contudo, em um sólido, vários elétrons se movem na rede durante a condução. Com isso, é natural que possa haver alguma interação entre esses elétrons. Dentro deste contexto, um modelo baseado em apenas duas partículas interagentes tem sido muito explorado por apresentar aspectos físicos relevantes que auxiliam o entendimento das propriedades de sistemas com partículas interagentes de densidade finita. Essa nova abordagem resultou na formulação de vários trabalhos, sendo Dima L. Shepelyansky [18] um dos primeiros a considerar o problema de dois elétrons interagentes em uma cadeia unidimensional.

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

Conforme discutido na seção 1.3, dependendo do grau de desordem em sistemas de alta dimensionalidade ($d > 2$), pode ocorrer uma mudança de comportamento (condutor/isolante) na condução do sistema, conhecida como transição de Anderson. Contudo, Mott propôs que a interação entre os elétrons da rede também pode promover um tipo de transição metal-isolante, conhecida como transição de Mott. Diante desses conceitos, para estudar um sistema que leva em conta essas características podemos combinar os modelos de Anderson e de Hubbard, obtendo o bem conhecido modelo de Anderson-Hubbard. Assim, podemos escrever o Hamiltoniano de Anderson-Hubbard, no formalismo de segunda quantização, como:

$$H = -t \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \quad (1.44)$$

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

Considerando dois interagentes e elétrons distinguíveis por número de spin, como nas referências [16, 17], podemos obter os auto-estados do sistema resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$H |\Psi(n_1, n_2)\rangle = E |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (1.45)$$

Aplicando o Hamiltoniano 1.44, obtemos:

$$\begin{aligned} H |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \underbrace{-t \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} \right)}_{H_1} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}}_{H_2} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{U} c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}}_{H_3} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \end{aligned} \quad (1.46)$$

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

Para $n_2 = n_1$:

- Para H_1 :

$$\begin{aligned} H_1 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= -t \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle) \end{aligned} \quad (1.47)$$

- Para H_2 :

$$H_2 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} 2\bar{\epsilon}_{n_1} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \quad (1.48)$$

- Para H_3 :

$$H_3 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \bar{U} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \quad (1.49)$$

Portanto, a partir das equações 1.47, 1.48 e 1.49, obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\begin{aligned} E |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [-t(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle) + (2\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{U}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle] \end{aligned} \quad (1.50)$$

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

- Para H_1 :

$$\begin{aligned} H_1 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= -t \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle) \end{aligned} \quad (1.51)$$

- Para H_2 :

$$H_2 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \quad (1.52)$$

Como H_3 possui um termo de interação de Hubbard, ele só existe para elétrons no mesmo sítio (como no caso anterior). Com isso, a equação de Schrödinger para $n_2 = n_1 + 1$ independe de H_3 . Logo, com as equações 1.51 e 1.52 obtemos:

$$\begin{aligned} E |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [-t(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle) + (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle] \end{aligned} \quad (1.53)$$

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

- Para H_1 :

$$\begin{aligned} H_1 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= -t \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle) \end{aligned} \quad (1.54)$$

- Para H_2 :

$$H_2 |\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+2}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \quad (1.55)$$

Como no caso anterior, a equação de Schrödinger independe de H_3 , visto que os elétrons não ocupam o mesmo sítio. Então, com as equações 1.54 e 1.55 obtemos:

$$\begin{aligned} E |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [-t(|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \\ &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle) \\ &+ (\bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle] \end{aligned} \quad (1.56)$$

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

$$\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{-t}, \quad U = \frac{\bar{U}}{-t} \quad \text{e} \quad \epsilon = \frac{E}{-t} \quad (1.57)$$

nas equações 1.50, 1.53 e 1.56, obtemos as equações:

- Para $n_2 = n_1$:

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

- Para $n_2 = n_1 + 1$:

$$\varepsilon f_{n_1, n_1+1} = f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + f_{n_1-1, n_1+1} + f_{n_1, n_1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1}) f_{n_1, n_1+1} \quad (1.59)$$

- Para $n_2 = n_1 + 2$:

$$\varepsilon f_{n_1, n_1+2} = f_{n_1+1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+3} + f_{n_1-1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2}) f_{n_1, n_1+2} \quad (1.60)$$

Comparando as equações 1.58, 1.59 e 1.60, finalmente obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\varepsilon f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2} \quad (1.61)$$

Na forma matricial, o Hamiltoniano é construído a partir de um espaço de Hilbert expandido de ordem N^2 . Portanto, considerando no caso unidimensional uma rede com, por exemplo, 3 sítios a matriz é escrita como:

$$H = \begin{array}{c|cccccccccc} N=3 & |1,1\rangle & |1,2\rangle & |1,3\rangle & |2,1\rangle & |2,2\rangle & |2,3\rangle & |3,1\rangle & |3,2\rangle & |3,3\rangle \\ \hline \langle 1,1| & 2\epsilon_1 + U & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1,2| & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1,3| & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 2,1| & 1 & 0 & 0 & \epsilon_2 + \epsilon_1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \langle 2,2| & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_2 + U & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \langle 2,3| & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_2 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 \\ \langle 3,1| & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 & 1 & 0 \\ \langle 3,2| & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_3 + \epsilon_2 & 1 \\ \langle 3,3| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_3 + U \end{array} \quad (1.62)$$

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

$$\det(H - \lambda I) = 0 \quad (1.63)$$

Isso pode ser feito utilizando rotinas numéricas apropriadas, como a biblioteca LAPACK [19] de rotinas de álgebra linear, utilizadas em nosso estudo.

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

$$H |\Psi(n_1, n_2)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (1.64)$$

De forma similar ao caso estacionário, aplicamos o Hamiltoniano de Anderson-Hubbard

à equação 1.64, obtendo:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= -t \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{n+1, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma} + c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n+1, \sigma} \right)}_{H_4} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma}}_{H_5} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow}}_{H_6} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (1.65)
\end{aligned}$$

Impondo as mesmas condições nas posições dos elétrons 1 e 2 (respectivamente n_1 e n_2) como no caso estacionário, e tomando $\hbar \approx 1$ obtemos a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2}(t) = f_{n_1+1, n_2}(t) + f_{n_1, n_2+1}(t) + f_{n_1-1, n_2}(t) + f_{n_1, n_2-1}(t) + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U \delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2}(t) \quad (1.66)$$

Com a equação 1.66 podemos obter a evolução temporal do pacote de onda. Para isso, podemos implementar um método numérico, como o método de Runge-Kutta.

1.5 Aperiodicidade na Distribuição de Potenciais

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

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}) \quad (1.67)$$

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

A distribuição da energia potencial é responsável por fenômenos interessantes relacionados aos auto-estados eletrônicos, caracterizando um comportamento metálico ou isolante de certos materiais. Isso resultou na formulação de diversos trabalhos que investigam os efeitos da distribuição sobre o comportamento dos materiais. Foi demonstrado que a presença de aperiodicidade e correlação na distribuição da desordem pode causar

uma violação na teoria de escala, apresentada na secção 1.3.1, conforme será melhor discutido no próximo capítulo. Além disso, Mott propõe que a interação entre os elétrons da rede também contribui para a transição metal-isolante, motivando diversos estudos que investigam o fenômeno de condução nos sólidos considerando essa característica.

Contudo, em sistemas de várias partículas não é tão simples resolver os modelos e obter as informações a respeito dos auto-estados eletrônicos. Um modelo mais simples, e que tem obtido bons resultados, é o sistema formado por dois elétrons interagentes. Um dos pioneiros a investigar sistemas desse tipo foi Shepelyansky [18], onde ele investiga as propriedades desse sistema em uma rede unidimensional. Esse modelo tem sido de grande importância para o estudo dos fenômenos de transporte eletrônico, resultando em diversas publicações.

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

2

DOIS ELÉTRONS INTERAGENTES EM UMA REDE APERIÓDICA UNIDIMENSIONAL

No capítulo anterior foram apresentados alguns modelos que tentam explicar a condução nos sólidos. Conforme discutido anteriormente, a maioria dos sólidos apresenta algum tipo de desordem ou aperiodicidade. Devido à presença de desordem ocorrem múltiplas reflexões da função de onda que interferem entre si, causando a chamada localização de Anderson. A localização de Anderson reduz a mobilidade eletrônica, levando o sistema a um estado isolante. Sistemas com dimensão alta ($d > 2$) e grau de desordem fraco podem apresentar estados estendidos e, portanto, um comportamento metálico. Para desordem forte, mesmo em dimensão alta, os estados são localizados e o sistema não conduz. A transição entre estados estendidos e localizados, induzida pela intensidade da desordem é conhecida como transição metal/isolante. Nos últimos vinte anos foi descoberto que o tipo de distribuição de desordem utilizado pode influenciar no comportamento do sistema, principalmente em dimensão baixa. Diversos autores ([20, 21, 22, 23, 24]) demonstraram que a presença de correlações na distribuição de desordem pode modificar totalmente o comportamento isolante predominante em $d = 1$. A seguir, discutiremos os efeitos das distribuições aperiódicas de potenciais sobre a natureza dos estados eletrônicos. Vamos discutir resumidamente o efeito destas correlações e em seguida vamos apresentar nossos resultados, que consistem em investigar a competição entre distribuições aperiódicas, interação elétron-elétron e campos elétricos.

2.1 Potenciais Aperiódicos: Efeitos de Correlação

Como visto na seção 1.3.1, foi proposta uma teoria de escala onde foi demonstrado que em sistemas de alta dimensionalidade ($d > 2$) deve existir uma transição metal/isolante. Assim, a partir de 1970 diversos trabalhos foram produzidos tentando explicar esse fenômeno de transição nos sólidos. Esses trabalhos investigaram a influência

da distribuição de desordem e verificaram que a presença de correlação causa um comportamento intermediário entre o caso periódico e o caso aleatório, não previsto pelo modelo de Anderson unidimensional.

Em 1980, J.B. Sokoloff [23], baseado no trabalho de M.Ya. Azbel [24], estudou a localização eletrônica no modelo *tight binding*, cuja equação de Schrödinger é:

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

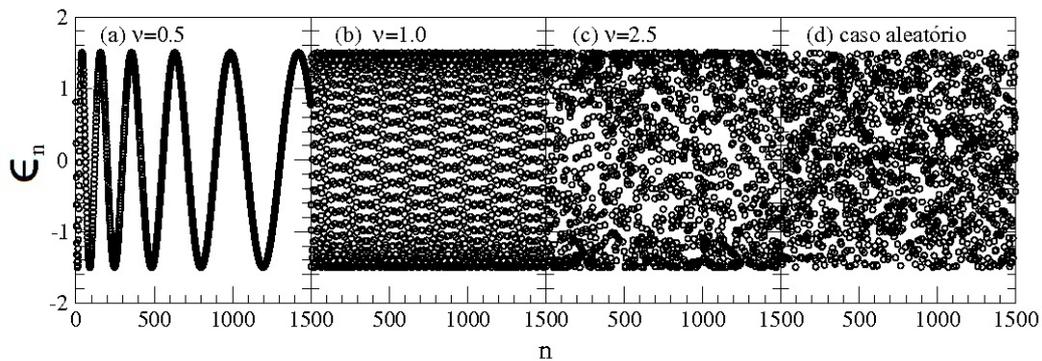
onde n representa um sítio e a é o espaçamento da rede, V_0 é a amplitude de potencial, E é o auto-valor de energia, f_n é o coeficiente de expansão para a função $\psi(x) = \sum_n f_n \phi(x-na)$ e ϕ representa o orbital atômico. Nesse trabalho Sokoloff considera um potencial de valor incomensurável.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

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

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

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

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



Fonte: Autor (2014).

No final da década de 1980, Thouless [22] investigou a localização em um modelo unidimensional para 1 elétron, retomando o problema proposto por Griniasty e Fishman.

Nesse trabalho, ele encontrou que o comprimento de localização aumenta a medida em que se aproxima do centro da banda, de modo que os resultados não podem ser obtidos diretamente através da teoria de perturbação. Com base nisso, Sarma *et al* [20, 25] aplica o modelo tight-binding unidimensional, onde é encontrada uma dependência do grau de localização com a amplitude de potencial V e os valores de ν . Os resultados obtidos apresentaram o seguinte:

- Para $0 < \nu < 1$ e $V < 2$:
Os estados são estendidos na faixa $-2 + V < E < 2 - V$.
Os estados são localizados nas faixas $2 - V < E < 2 + V$ e $-2 - V < E < -2 + V$.
- Para $0 < \nu < 1$ e $V > 2$:
Todos os estados são localizados.
- Para $\nu = 1$ e $V < 2$:
Todos os estados são estendidos.
- Para $\nu = 1$ e $V > 2$:
Todos os estados são localizados.
- Para $1 < \nu < 2$:
Todos os estados são localizados, mas o expoente de Lyapunov (o inverso do comprimento de localização) se aproxima de zero, lentamente, no centro da banda ($E = 0$).
- Para $\nu \geq 2$:
Todos os estados são exponencialmente localizados: o sistema se comporta como no modelo de Anderson unidimensional.

A presença de correlação na distribuição da desordem também é responsável por comportamentos não previstos no modelo de Anderson unidimensional. No trabalho de Moura e Lyra [26], uma correlação de longo alcance é introduzida nos elementos da diagonal do hamiltoniano de Anderson, representando uma desordem nos sítios da cadeia. Eles conseguiram mostrar uma fase de estados estendidos no centro da banda, ou seja, existe uma transição metal-isolante em sistemas desordenados unidimensionais.

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

2.2 Resultados: Aspectos Estacionários

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

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

sendo ϵ_{n_1} e ϵ_{n_2} as energias dos elétrons 1 e 2 ao ocupar as posições n_1 e n_2 , respectivamente, e U é a energia de interação entre os elétrons quando eles ocupam o mesmo sítio. Assim, aplicamos uma técnica de diagonalização direta, utilizando as rotinas LAPACK [19], para resolver a equação secular $\det(H - I\lambda) = 0$ e obter os auto-valores e auto-vetores do sistema.

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

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

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

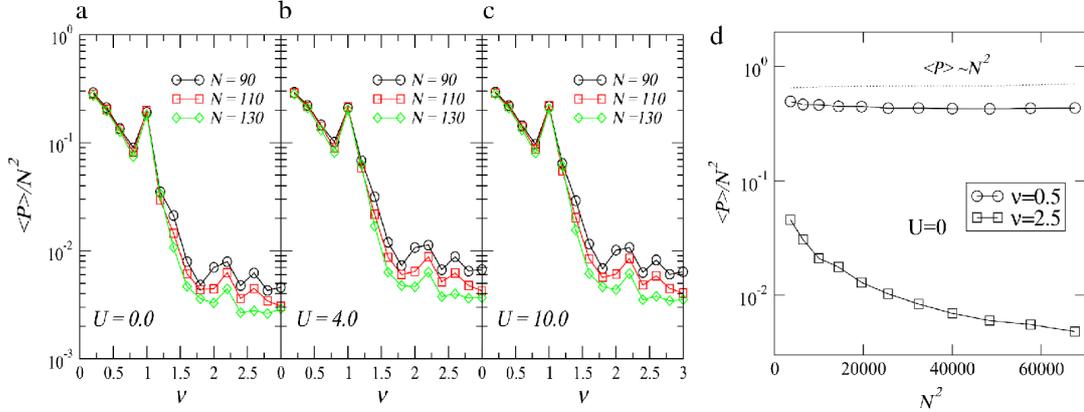
$$\frac{\langle P \rangle}{N^2} = \frac{\sum_{|E| < 0.5} P(E)}{N_E N^2} \quad (2.5)$$

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

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

Na figura 2.2d nos mostra uma comparação dos resultados de $\langle P \rangle / N^2$ versus N^2 , sem interação, obtidos para $\nu = 0.5$ e $\nu = 2.5$. Nessa imagem é mostrado mais claramente

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

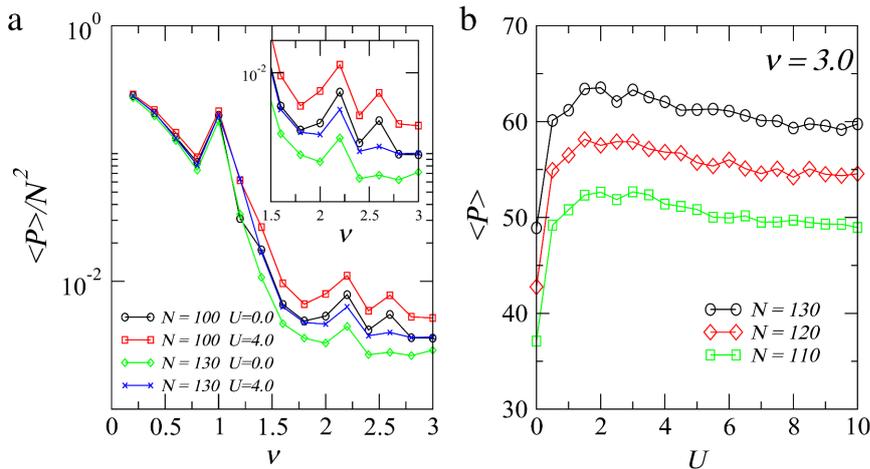


Fonte: Peixoto *et al* (2014) [27].

que em regimes estendidos a participação média é, de fato, proporcional ao tamanho da cadeia, enquanto que no regime localizado a participação decai exponencialmente com N^2 . Estes resultados estão de acordo com a literatura ([20, 21, 22, 25]).

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

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



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [27].

mente ocorre o colapso dos dados para $\nu \leq 1$, caracterizando o comportamento metálico; para $\nu > 1$, o sistema é dominado por estados localizados (comportamento isolante). O detalhe nos mostra que a participação é menor em redes maiores no regime localizado,

corroborando os resultados mostrados anteriormente. Na figura 2.3b temos $\langle P \rangle$ versus U , onde podemos ver que a participação aumenta rapidamente até que U atinja um valor intermediário. À medida que U aumenta, a participação começa a diminuir lentamente. Independente do tamanho da cadeia esse comportamento é observado. Concluimos que isso ocorre porque uma interação intermediária promove um movimento coerente dos elétrons, causando uma diminuição na localização de Anderson. Quanto mais forte fica a interação, maior fica o custo energético para manter os dois elétrons próximos, tornando os movimentos dos elétrons menos coerentes. Dessa forma o sistema se comporta como no caso de um único elétron e o grau de localização volta a crescer.

2.3 Resultados: Aspectos Dinâmicos

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

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

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

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

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

$$\langle n_1 s_1, n_2 s_2 | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{\beta(\sigma)} \exp \left[-\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2} \right] \exp \left[-\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2} \right] \quad (2.8)$$

onde $\beta(\sigma)$ é uma constante de normalização, σ é a largura do pacote de onda e n_1^0 e n_2^0 são, respectivamente, as posições iniciais dos elétrons 1 e 2. Consideramos que os pacotes de onda de largura $\sigma = 1.0$ estão inicialmente dispostos nos sítios $N/2 - d_0$ e $N/2 + d_0$, com N sendo o tamanho da rede.

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

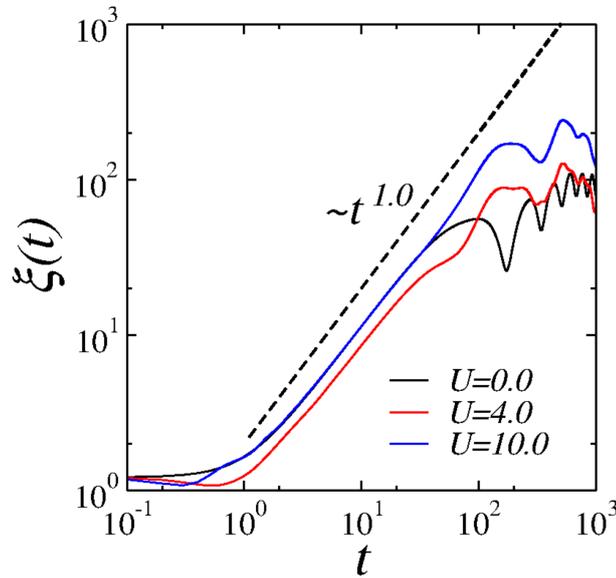
$$\xi(t) = \sum_{n_1, n_2} \sqrt{(n_1 - \langle n_1(t) \rangle)^2 + (n_2 - \langle n_2(t) \rangle)^2} |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad (2.9)$$

sendo

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

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

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



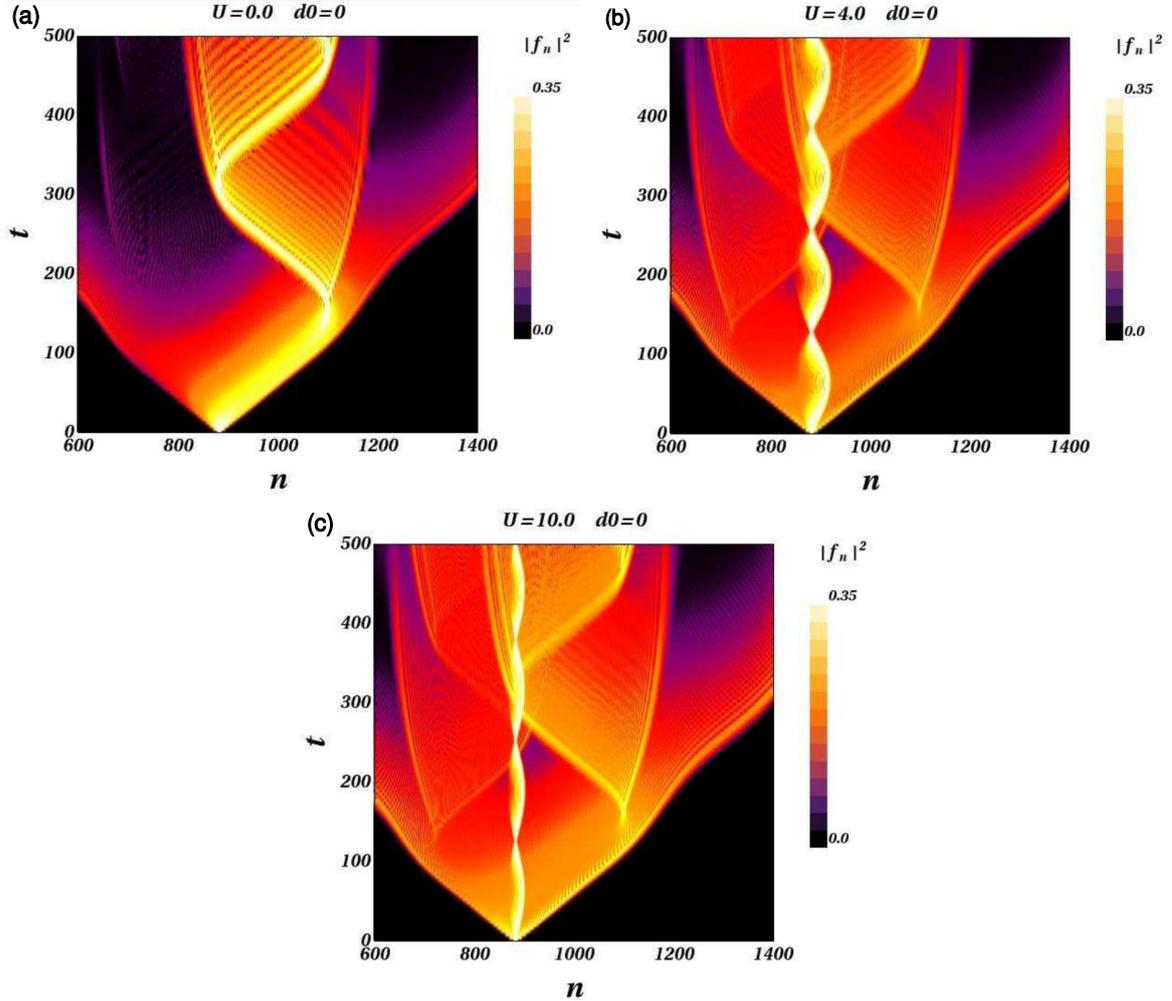
Fonte: Peixoto *et al* (2014) [27].

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

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

O comportamento oscilatório das partículas, mostrado na figura 2.5, é similar às já bem conhecidas oscilações de Bloch [6], onde os elétrons oscilam quando um campo

Figura 2.5: Centroide de uma partícula em uma rede de $N = 2000$ sítios, com $V = 1.5$, $\nu = 0.5$, $\pi\alpha = 1.0$, $\sigma = 1.0$ e $n_1^0 = n_2^0 = 882$. As cores representam a amplitude de probabilidade $|f_n(t)|^2$ para um elétron. Em (a) não há interação ($U = 0.0$); em (b), temos uma interação intermediária ($U = 4.0$); em (c) a interação é forte ($U = 10.0$). Podemos ver nas figuras que o centroide tem comportamento oscilatório.



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [27].

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

2.3.1 Oscilações de Bloch: efeitos do campo local

A presença de campos elétricos e magnéticos atuando sobre redes tem despertado interesse dos físicos, resultando na publicação de vários trabalhos, como [28, 29]. Quando um campo elétrico é aplicado paralelo à rede, os elétrons passam a ter um comportamento oscilatório, conhecido como *oscilações de Bloch*.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Mas:

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

Igualando 2.16 com 2.15 obtemos:

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

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

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

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

Embora a proposta original ter sido formulada para sistemas cristalinos, este fenômeno também é encontrado na literatura em sistemas não cristalinos [29]. Mais recentemente, Dias e Lyra [30] mostram que a interação entre duas partículas pode promover oscilações de Bloch coerentes entre as mesmas, proporcionando a observação de um dobramento da frequência de oscilação (frequência de Bloch). Um análogo óptico para este fenômeno tem sido observado em redes fotônicas, onde os autores sugerem tais sistemas como bons candidatos para ensaios experimentais dos estudos sobre transporte eletrônico.

Diante da fenomenologia apresentada, estudamos também a dinâmica dos dois elétrons em cadeias aperiódicas sujeitas a um campo elétrico externo e constante, alinhado paralelamente ao sentido da cadeia. Para isso, primeiro acrescentamos um termo referente ao campo externo no Hamiltoniano de Anderson-Hubbard, reescrevendo a equação 1.44 como:

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

onde F é o campo elétrico uniforme externo, e é a carga da partícula e n é a posição da partícula. Dessa forma, usando a grandeza adimensional $\mathcal{F} = \frac{F}{-t}$, a equação 2.6 é reescrita como:

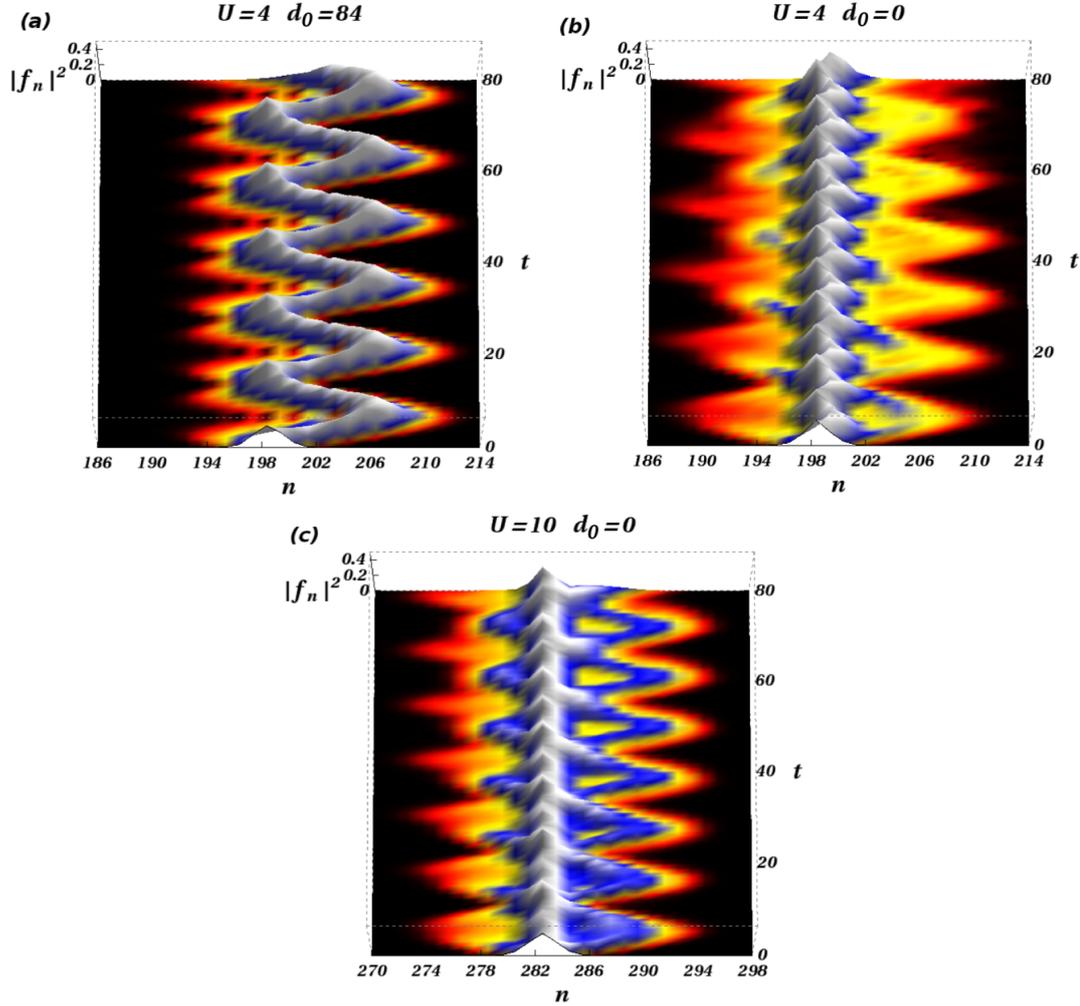
$$i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_2} + \mathcal{F}n_2 + U\delta_{n_1, n_2}) f_{n_1, n_2} \quad (2.20)$$

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

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

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

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



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [27].

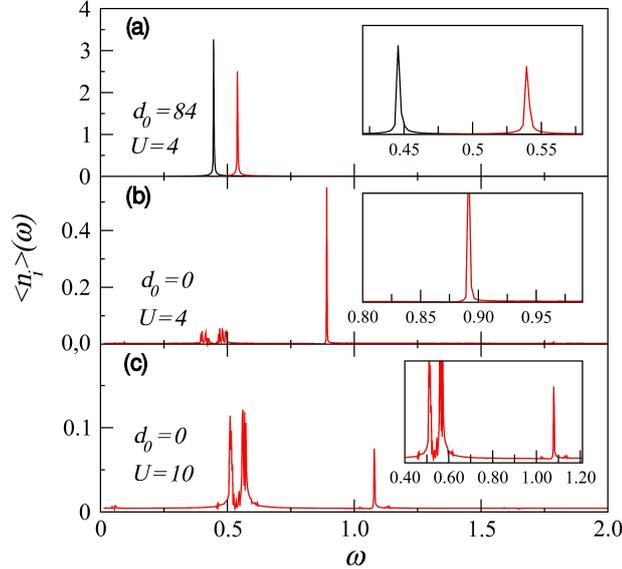
($U = 10.0$) o caráter repulsivo predomina, diminuindo o grau de correlação no movimento dos elétrons.

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

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

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

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



Fonte: Peixoto *et al* (2014) [27].

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

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

Aplicando a técnica de diagonalização direta, através do uso de rotinas Lapack, obtivemos os autovalores de energia em cadeias de $N = 90, 110, 130$ sítios. Visando investigar a influência da interação eletrônica sobre os auto-estados, calculamos a participação média. Verificamos que para $\nu \leq 1.0$ há uma dominância de estados estendidos no sistema, enquanto que para $\nu > 1.0$ os estados passam a ser localizados. Também observamos que a presença de interação causa uma diminuição na localização de Anderson. Os resultados estão de acordo com os resultados encontrados na literatura ([18, 20, 21, 22, 25]). Outra abordagem que consideramos foi a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Desta forma investigamos a dinâmica temporal de um pacote de onda de dois elétrons, inicialmente localizado próximo ao centro da cadeia. Analisando a extensão espacial do pacote de onda eletrônico, verificamos que no limite de fraca aperiodicidade ($\nu < 1$) o pacote de onda evolui de forma balística, independente da interação elétron-elétron. Esta dinâmica rápida está em boa concordância com a natureza deslocalizada dos auto-estados para $\nu < 1$ (ver figura 2.2).

Além do termo de interação Coulombiana e o potencial aperiódico diagonal, investigamos os efeitos de um campo elétrico estático paralelo a cadeia. O Hamiltoniano

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

Os principais resultados desta dissertação foram publicados na referência [27]. Como perspectiva de nosso trabalho podemos citar estudar o papel da dimensionalidade do sistema nesta fenomenologia. Desta forma, seria interessante investigar qual a natureza dos estados eletrônicos em sistemas aperiódicos bidimensionais.

REFERÊNCIAS

- [1] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958.
- [2] MOTT, N. F. The basis of the electron theory of metals, with special references to the transition metals series a. *Proceedings of the Physical Society of London*, v. 416, p. 416–422, 1949.
- [3] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society A*, v. 276, n. 1365, p. 238–257, 1963.
- [4] BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, v. 52, n. 7-8, p. 555–600, 1929.
- [5] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. [S.l.]: Thomson Learning, 1976.
- [6] KITTEL, C. *Introduction to Solid State*. 7. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1996.
- [7] OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. de. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 1. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2005.
- [8] TIPLER, P.; MOSCA, G. *Física para Cientistas e Engenheiros - Física Moderna: Mecânica Quântica, Relatividade e Estrutura da Matéria*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [9] DIAS, W. da S. *Dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas e aperiódicas: Efeitos de campo elétrico*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Alagoas, 2007.
- [10] MOURA, F. A. B. F. de. *Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Alagoas, 1999.
- [11] LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. Disordered electronic systems. *Reviews of Modern Physics*, v. 57, p. 287, 1985.
- [12] THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Physics Reports*, v. 13, n. 3, p. 93–142, 1974.
- [13] ABRAHAMS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Physical Review Letters*, v. 42, n. 10, p. 673–676, 1979.
- [14] MOTT, N. F. Metal-insulator transition. *Reviews of Modern Physics*, v. 40, n. 4, p. 677–683, 1968.

- [15] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: John Wiley, 2005.
- [16] BRITO, P. E.; RODRIGUES, E. S.; NAZARENO, H. N. Two interacting electrons in one-dimensional deterministic aperiodic systems: Fibonacci and thue-morse lattices. *Physical Review B*, v. 73, p. 1–11, 2006.
- [17] RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 3, p. 515–518, 1997.
- [18] SHEPELYANSKY, D. L. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Physical Review Letters*, v. 73, n. 19, p. 2607–2610, 1994.
- [19] ANDERSON, E. et al. *Lapack users'guide*. [S.l.]: Society for Industrial and Applied Mathematic, 1999.
- [20] SARMA, S. D.; HE, S.; XIE, X. C. Localization, mobility edges, and metal-insulator transition in a class of one-dimensional slowly varying deterministic potentials. *Physical Review B*, v. 41, p. 5544, 1990.
- [21] GRINIASTY, M.; FISHMAN, S. Localization by pseudorandom potentials in one dimension. *Physical Review Letters*, v. 60, n. 13, p. 1334–1337, 1988.
- [22] THOULESS, D. J. Localization by a potential with slowly varying period. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 18, p. 2141–2143, 1988.
- [23] SOKOLOFF, J. B. Electron localization in crystals with quasiperiodic lattice potentials. *Physical Review B*, v. 22, n. 12, p. 5823–5828, 1980.
- [24] AZBEL, M. Y. Quantum particle in one-dimensional potentials with incommensurate periods. *Physical Review Letters*, v. 43, p. 1954–1957, 1979.
- [25] SARMA, S. D.; HE, S.; XIE, X. C. Mobility edge in a model one-dimensional potential. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 18, p. 2144–2147, 1988.
- [26] MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Physical Review Letters*, v. 81, p. 3735, 1998.
- [27] PEIXOTO, A. S. et al. Wavepacket dynamics of coupled particles in aperiodic chains: Weakening of anderson localization and local fields effects. *Physica A*, v. 394, p. 22–30, 2014.
- [28] MOURA, F. A. B. F. de et al. Bloch oscillations in an aperiodic one-dimensional potential. *Physical Review B*, v. 71, p. 1–6, 2005.
- [29] DOMÍNGUEZ-ADAME, F. et al. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Physical Review Letters*, v. 91, n. 19, p. 1–4, 2003.
- [30] DIAS, W. S.; LYRA, M. L. Non monotonic influence of hubbard interaction on the anderson localization of two-electron wavepackets. *Physica A*, 2014.