

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

Dois elétrons interagentes em cadeias  
cristalinas e aperiódicas: Efeitos de campo  
elétrico.

WANDEARLEY DA SILVA DIAS

Maceió - Brasil  
Julho - 2007

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

Dois elétrons interagentes em cadeias  
cristalinas e aperiódicas: Efeitos de campo  
elétrico.

WANDEARLEY DA SILVA DIAS

Dissertação apresentada no Instituto de Física  
da Universidade Federal de Alagoas como parte dos  
créditos para a obtenção do título de Mestre em  
Ciências.

Orientador:

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura

Maceió - Brasil

Julho - 2007



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

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões  
Cidade Universitária  
Tabuleiro dos Martins  
57072-970 Maceió - AL, Brasil  
FONE : (82) 3214-1423/FAX : 3214-1645

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

*"Dois elétrons em cadeias cristalinas e aperiódicas :  
Efeito do campo elétrico"*

por

*Wandearley da Silva Dias*

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (Orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e José Soares Andrade Júnior, do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, consideraram o candidato aprovado com grau " **A** ".

Maceió, 31 de agosto de 2007

  
Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

  
Prof. Marcelo Leite Lyra

  
Prof. José Soares Andrade Júnior

Aos  
meus pais Deusdete e Eleusa  
e ao meu irmão Wanderson

## AGRADECIMENTOS

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

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

Ao meu irmão Wanderson, outra pessoa de extrema importância para mim, agradeço pelos vários momentos de descontração, confiança, paciência e carinho. A distância e o tempo apresentaram-me o lado incentivador do meu irmão, mostrando o seu amadurecimento como pessoa, além do grande amigo a quem pude recorrer por diversas vezes.

À minha namorada Socorro, agradeço eternamente. Além do carinho, amizade, companheirismo e paciência, sua garra, determinação e organização são exemplos para que eu continue buscando os meus objetivos.

A dois grandes professores que tive na graduação, Luiz e Jorge. Além da grande contribuição na minha formação profissional, agradeço pelo grande incentivo e confiança na busca do mestrado.

Ao meu orientador Prof. Francisco Fidélis, agradeço pela grande paciência, prestatividade e pelos conhecimentos transmitidos no decorrer dos estudos presentes neste trabalho. Além disto, a minha admiração quanto a sua eficiência e agilidade ao desenvolver suas atividades. O seu caráter humano aliado à sua competência profissional mostram o grande orientador que é e com o qual tive oportunidade de trabalhar.

A todos os meus familiares que também fizeram parte desta conquista, gostaria de agradecer o grande apoio recebido. Dentre estes, os meus agradecimentos para: minha tia, madrinha e “segunda-mãe” Neide, pelo imenso carinho a mim dedicado; minhas tias Heliana, Geni e Eleni; meus primos Darcílio, Silvio, Silvia e Natália.

Aos amigos que, mesmo distante, torceram e me incentivaram a chegar ao término desta etapa: Sérgio, Cristiane, Roberto, Mônica, Hélio, Valéria, Dênis, Wilma, Bruno, Leanny, Whagnon, Graça, Rogério, Denise e Josué.

Ao casal Elton e Sybelle pela amizade, alegria e prestatividade em diversos momentos.

Ao casal Rogério e Valdirene pela amizade, confiança e auxílio em momentos bastante difíceis.

A todos os amigos que conquistei no IF neste período, obrigado pelo apoio e momentos de descontração. Em especial gostaria de agradecer à César e Francisco, dois grandes amigos que me ajudaram em momentos bastante difíceis.

Aos amigos José Nailton, Briza, Cristiane e Fernando, que, além do incentivo, ajudaram-me a superar alguns obstáculos.

Aos professores Gandhi, Iram, Dilson e Fidélis, pelas aulas ministradas durante o curso de mestrado.

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

Agradeço ao CNPQ pelo apoio financeiro que possibilitou a continuidade dos meus estudos.

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

## Resumo

Recentemente, a competição entre localização dinâmica e interação elétron-elétron tem sido alvo de vários estudos. Nesta dissertação de mestrado, nossa contribuição visa o entendimento do fenômeno das oscilações de Bloch de dois elétrons interagentes em cadeias unidimensionais periódicas e aperiódicas. Nós utilizamos dois formalismos distintos para escrever a equação de Schrödinger associada ao Hamiltoniano de Anderson-Hubbard. Para estudar as oscilações de Bloch para dois elétrons interagentes observamos a influência do campo elétrico no comportamento de um pacote de onda Gaussiano. Foi utilizado um método numérico para resolver a equação de Schrödinger e encontrar a densidade de estados, bem como, os auto-estados estacionários. Mostramos que o campo elétrico promove oscilações de Bloch cujo modo predominante apresenta uma frequência dupla dependendo das relativas contribuições oriundas de estados ligados e não-ligados. Os valores para essa frequência característica e amplitude das oscilações de Bloch serão discutidas sobre a luz de uma aproximação semi-clássica.

## Abstract

Recently, much attention was driven to the interplay between dynamical localization and electron-electron interaction. In this master degree thesis we contribute to further understanding of the phenomenon of electronic Bloch oscillations in both periodic and aperiodic low-dimensional systems with two interacting electrons. We followed two distinct quantum formalism to write the Schrödinger equation associated with the Anderson-Hubbard hamiltonian. To study the two-electron Bloch oscillations we focus on the electric-field biased wave-packet evolution of a initially gaussian wave-packet. In addition we use numerical methods to solve the Schrödinger equation and compute the density of states as well as the stationary eigenstates. We show that the electric field promotes sustained Bloch oscillations, whose predominant mode displays a frequency doubling depending on the relative contributions coming from bounded and unbounded states. The values for the characteristic frequency and amplitude of the Bloch oscillations will be discussed under the light of a semi-classical approach.



# Sumário

Folha de rosto . . . . .	i
Dedicatória . . . . .	ii
Agradecimentos . . . . .	iii
Resumo . . . . .	v
Abstract . . . . .	vi
Sumário . . . . .	vii
<b>1 Fundamentação Teórica</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução . . . . .	1
1.2 Modelo de Bloch . . . . .	4
1.3 Modelo de Anderson . . . . .	6
1.3.1 Teoria de Escala para a Transição de Anderson . . . . .	10
1.4 Aperiodicidade e Correlação na Desordem . . . . .	15
1.5 Transição de Mott . . . . .	20
1.6 Modelo de Hubbard . . . . .	21
1.7 Interação entre Duas Partículas . . . . .	22
<b>2 Dois Elétrons Interagentes Sob Influência de Campo Elétrico Uniforme</b>	<b>25</b>
2.1 Introdução . . . . .	25
2.1.1 Sistemas de partículas idênticas . . . . .	26
2.2 Dois Elétrons em um Sólido Linear . . . . .	28
2.2.1 Abordagem I (A1) . . . . .	28
2.2.2 Abordagem II (A2) . . . . .	37
2.3 Presença do Campo Elétrico . . . . .	44

---

<b>3</b>	<b>Oscilações de Bloch para dois elétrons interagentes</b>	<b>57</b>
3.1	Introdução . . . . .	57
3.2	Dois elétrons em cadeias cristalinas . . . . .	58
3.2.1	Abordagem (A1) . . . . .	58
3.2.2	Abordagem (A2) . . . . .	63
3.3	Dois elétrons em cadeias aperiódicas . . . . .	70
3.3.1	Abordagem (A1) . . . . .	70
3.3.2	Abordagem (A2) . . . . .	74
<b>4</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>81</b>
	<b>Apêndice A</b>	<b>84</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>91</b>

# Capítulo 1

## Fundamentação Teórica

### 1.1 Introdução

O estudo das propriedades eletrônicas em estruturas cristalinas é um campo de bastante relevância na Física do Estado Sólido. No início do século passado, após a descoberta dos raios X, foi possível a comprovação de vários cálculos e previsões teóricas simples sobre o espaçamento atômico médio, também chamado de parâmetro de rede. As formulações da Mecânica Estatística e Mecânica Quântica possibilitaram que diversas propriedades físicas dos sólidos periódicos e homogêneos fossem bastante estudadas e desenvolvidas até o ponto que nós conhecemos hoje. Com o conhecimento dessas duas últimas formulações, devido a existência de simetria translacional em sólidos cristalinos, a descrição de partículas ou excitações coletivas<sup>1</sup> é feita por uma função de onda estendida por todo o sistema. Este resultado é obtido, por exemplo, através do modelo de Bloch que considera elétrons não interagentes na presença de um potencial periódico. Bloch demonstrou que as soluções da equação de Schrödinger neste caso são:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.1)$$

onde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  possui período igual ao da rede cristalina, sendo  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{l})$ . Este modelo prevê a ausência de resistência elétrica para um material perfeitamente cristalino.

Entretanto, uma grande parte dos sólidos encontrados na natureza, e mesmo os produzidos em laboratório, não são constituídos por uma estrutura cristalina perfeita e

---

<sup>1</sup>como exemplo de quasi-partículas e excitações coletivas podemos citar mágnons e fônons.

homôgena. Qualquer desvio da estrutura periódica constitui uma imperfeição. Quando um sistema apresenta várias imperfeições em sua estrutura cristalina, dizemos se tratar de um sistema desordenado, que pode ser classificado como: sistema com desordem estrutural, no qual os átomos são distribuídos aleatoriamente sem qualquer arranjo espacial particular; e sistema com desordem composicional, quando diferentes tipos de íons, impurezas químicas ou sítios vazios ocupam aleatoriamente pontos de uma rede periódica perfeita. A distribuição da desordem pode ser do tipo “temperada” ou “recozida”. A desordem temperada que é obtida, em geral, através de processos de resfriamento brusco a partir de altas temperaturas, apresenta funções de correlações locais. No segundo caso, o arranjo atômico é correlacionado, decorrente de um processo de resfriamento lento. A presença de desordem na distribuição atômica despertou um grande interesse na Física da Matéria Condensada, tendo Anderson [1] como pioneiro a entender o papel da desordem na função de onda eletrônica. Em linhas gerais, Anderson mostrou que a presença de desordem na estrutura atômica induz o fenômeno da localização da função de onda eletrônica, ou seja, a função de onda eletrônica sofre reflexões incoerentes nas barreiras de potencial. Estas ondas refletidas interferem destrutivamente de modo que a função de onda eletrônica resultante é não-nula apenas em uma região finita da cadeia. Daí vem o nome “localização da função de onda eletrônica”, devido ao elétron ficar restrito a uma região finita da cadeia. É muito comum este fenômeno ser também chamado de “localização de Anderson”. Posteriormente, outros autores [2, 3, 4, 5, 6] também apresentaram suas contribuições. Em particular, foi demonstrado que a localização de Anderson ocorre em dimensões baixas ( $d \leq 2$ ) para qualquer grau de desordem. Em dimensões elevadas ( $d > 2$ ), foi mostrado a possibilidade do sistema, mesmo desordenado, suportar estados eletrônicos estendidos por toda a rede. A mudança de comportamento de estados estendidos para estados localizados é chamada de transição metal-isolante ou transição de Anderson.

Nas últimas décadas, uma série de trabalhos têm sido apresentados nos quais a energia potencial atômica consiste de uma distribuição de desordem correlacionada [7, 8, 9, 10] bem como de sequências pseudo-aleatórias [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]. A presença destes novos ingredientes no arranjo atômico revelou a possibilidade de um comportamento anômalo no modelo de Anderson. Em linhas gerais, foi demonstrado que estes ingredientes possibilitam uma transição de Anderson mesmo em dimensão baixa ( $d \leq 2$ ).

Outro aspecto altamente importante e ausente na formulação de Bloch é a interação elétron-elétron. O problema de  $N$  elétrons interagentes em uma rede com  $M$  átomos

é o objeto de estudo do famoso Modelo de Hubbard [20]. A física de sistemas eletrônicos interagentes é bastante complexa do ponto de vista teórico e/ou experimental. A presença da interação Coulombiana em sistemas eletrônicos induz também uma transição metal-isolante, chamada transição de Mott [21, 22, 23]. A transição de Mott ocorre quando o custo energético de uma dupla ocupação excede o energia média da banda de valência. O estudo da transição de Mott, através do Modelo de Hubbard, é uma tarefa não trivial, que envolve técnicas de teoria de campos, formalismos de campo médio, métodos de diagonalização em blocos, diagonalização exata tipo Lanczos bem como métodos de grupo de renormalização. Uma possível simplificação do modelo de Hubbard, que não remove o grau de interesse da física obtida, é considerar um pequeno número  $N$  de elétrons. Shepelyansk [24] foi um dos primeiros autores a considerar o problema de dois elétrons em uma cadeia unidimensional desordenada. O autor verificou que a interação entre dois elétrons pode induzir uma propagação coerente entre os mesmos, tendo um comprimento de localização maior que o comprimento de localização de uma única partícula. Este novo efeito despertou um grande interesse na comunidade científica, tornando-se alvo de vários estudos encontrados na literatura [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31].

Com o advento da tecnologia de manufaturação de materiais em escala nanoscópica, os sistemas de baixa dimensionalidade deixaram de ser problemas de interesse acadêmico para serem sistemas fisicamente realizáveis. A tecnologia atual é capaz de fabricar estruturas em que uma ou mais dimensões são confinadas de tal maneira que os graus de liberdade transversais encontram-se congelados em temperaturas suficientemente baixas [32]. Uma fonte de grande interesse por esses sistemas é o estudo de propriedades de transporte. Dentro do contexto apresentado acima, esta dissertação de mestrado tem como objetivo estudar o problema de dois elétrons interagentes em cadeias cristalinas e aperiódicas. Um aspecto central neste tipo de problema é entender como um campo elétrico constante afeta as propriedades eletrônicas. Utilizando um formalismo numérico para resolver a equação de Schrödinger deste modelo, mostraremos que o sistema apresenta oscilações quando o campo elétrico é aplicado. Dependendo da condição inicial que o sistema de elétrons interagentes é preparado, a frequência principal das oscilações de Bloch obtidas é da ordem do dobro da frequência de Bloch prevista por argumentos semi-clássicos.

Na continuação deste capítulo iremos apresentar uma revisão teórica sobre propriedades de transporte eletrônico em sistemas cristalinos e com desordem. Além disso, devido ao seu grau de relevância, apresentaremos alguns modelos que retratam a influência da interação Coulombiana sobre o transporte de onda eletrônico. No segundo capítulo,

apresentaremos duas diferentes abordagens para o estudo de elétrons interagentes. Motivados pelo grande interesse da comunidade científica no fenômeno das oscilações de Bloch [33, 34, 35], mostraremos a influência de um campo elétrico uniforme e constante sobre um elétron utilizando argumentos semi-clássicos já conhecidos na literatura [36]. Ao fim deste capítulo veremos dois modelos unidimensionais que permitem estudar a influência do campo elétrico sobre dois elétrons interagentes. No terceiro capítulo, apresentaremos resultados para ambas as abordagens, explorando possíveis particularidades. O capítulo quatro será composto de conclusões e perspectivas de futuros estudos.

## 1.2 Modelo de Bloch

O modelo de Bloch apresenta um papel fundamental na descrição do movimento de elétrons de condução sobre influência de um potencial cristalino. Ao estudarmos o problema de elétrons em sólidos, devemos verificar a relevância, por exemplo, das interações do elétron com os íons da rede e da interação elétron-elétron. Consideremos a seguir a aproximação de elétrons independentes em uma rede periódica unidimensional formada de  $N$  íons monoatômicos com uma constante de rede  $a$ . Assim, um potencial iônico ( $V(x)$ ) colocado na origem é definido na extensão  $-a/2 < x \leq a/2$  e possui um vizinho na posição  $x = a$ . Por se tratar de íons idênticos, temos  $V(x) = V(x + a)$  (ver fig.1.1). Usando o

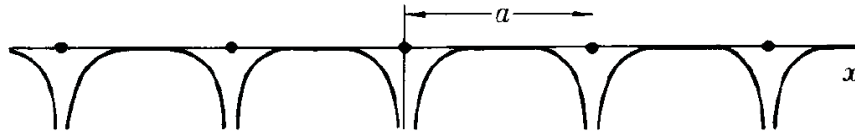


Figura 1.1: Padrão típico de um potencial cristalino.

mesmo raciocínio para os demais íons da cadeia, nós obtemos

$$V(x) = V(x + a) = V(x + 2a) = \dots = V(x + (N - 1)a) \quad (1.2)$$

onde  $V(x + ma)$  é definido numa extensão  $\frac{a}{2} + ma < x \leq \frac{a}{2} + ma$ , sendo ( $m=0,1,\dots,N-1$ ).

A condição periódica de contorno é imposta de forma que o íon para  $x = 0$  coincida com o íon da posição  $x = Na$ .

$$V(x) \equiv V(x + Na) \quad (1.3)$$

Desta forma temos um anel de comprimento  $Na$ , constituído de  $N$  íons distribuídos igualmente espaçados com constante de rede  $a$ .

A equação de Schrödinger para cada íon pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) &= E\psi(x) \\ \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2\psi(x+a)}{dx^2} + V(x+a)\psi(x+a) &= E\psi(x+a) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2\psi(x+(N-1)a)}{dx^2} + V(x+(N-1)a)\psi(x+(N-1)a) &= \\ &E\psi(x+(N-1)a) \end{aligned} \quad (1.4)$$

As funções de onda em  $x$  e  $x+a$  são respectivamente  $\psi(x)$  e  $\psi(x+a)$ . Estas duas últimas possuem mesmo auto-valor energia ( $E$ ) diferindo apenas de um fator de fase que podemos escrever como:

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \quad |\lambda|^2 = 1 \quad (1.5)$$

Raciocinando igualmente para as demais funções de onda, nós obtemos a relação:

$$\psi(x+Na) = \lambda^N\psi(x) \quad (1.6)$$

Esta última quando associada à equação (1.3), encontra-se:

$$\lambda^N = 1 \quad (1.7)$$

que pode ser resolvida considerando

$$\lambda = \exp\left(\frac{2\pi ni}{N}\right) \quad (1.8)$$

onde  $n$  é um inteiro na extensão de 0 até  $N-1$ . Assim, para uma rede unidimensional, a função de onda  $\psi(x)$  para um elétron propagando em um potencial cujo período é  $a$ , pode

ser expressa por:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{2\pi i n x}{Na}\right) u(x) \quad (1.9)$$

onde uma função arbitrária  $u(x)$  é uma função periódica em  $a$  e satisfaz a relação  $u(x + ma) = u(x)$ ,  $m$  sendo um inteiro positivo.

Da mesma forma que escrevemos o teorema de Bloch para uma dimensão, assumindo que a posição de cada íon em um cristal seja especificada pelo vetor  $\mathbf{l} = l_x \mathbf{a}_x + l_y \mathbf{a}_y + l_z \mathbf{a}_z$  ( $l_x, l_y, l_z =$  inteiros), a função  $\psi(\mathbf{r})$  do elétron num potencial periódico pode ser expresso da forma

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

onde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  satisfaz a relação  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . O vetor de onda  $\mathbf{k}$  possui propriedades semelhantes ao vetor de onda  $\mathbf{k}$  do modelo do elétron livre.

Entretando, como foi dito na seção 1.1, a estrutura cristalina dos sólidos encontrados na natureza e mesmos os produzidos em laboratório, não é perfeita e homogênea. O grau de desordem na sua estrutura cristalina nem sempre pode ser desprezado, tornando-se relevante os seus efeitos. Desse modo, para o melhor entendimento das propriedades de tais sólidos é preciso adotar modelos que levem em consideração essas características.

No fim da década de 50 foi apresentado na comunidade científica um modelo que levava em consideração os efeitos de desordem. P.W. Anderson [1] apresentou uma estimativa qualitativa da intensidade do potencial aleatório necessária para provocar a ausência de difusão eletrônica em certas redes aleatórias.

## 1.3 Modelo de Anderson

Em 1958, P.W. Anderson [1] apresentou um modelo que permitiu o estudo dos efeitos de desordem sobre a função de onda eletrônica. Anderson mostrou que, na presença de desordem, a natureza da função de onda pode mudar de estendida, como no caso das ondas de Bloch, para localizada.

Imagine o modelo de Bloch apresentado na seção 1.2, com o potencial periódico nulo ( $U(\mathbf{r}) = 0$ ), ou seja, um elétron livre. Ao introduzirmos uma única barreira de potencial para este sistema, a função de onda eletrônica será parcialmente transmitida e parcialmente refletida pela barreira. Façamos agora com que ao invés de uma única barreira, existam duas barreiras de potencial. Estas duas barreiras provocam a reflexão da função de onda,



gerando ondas refletidas e incidentes que podem sofrer interferências. As interferências podem mudar bastante o padrão da função de onda. Considere agora a presença de um potencial aleatório, que pode ser representado por barreiras de potencial posicionadas aleatoriamente ou possuindo intensidades aleatórias. A função de onda sofrerá várias reflexões, impedindo que esta mantenha uma coerência de fase. Dessa forma, se tivermos o grau de desordem fraco, a função de onda continua estendida, porém perde sua coerência em fase após muitas reflexões. O comprimento de coerência é o seu livre caminho médio (ver figura 1.2a).

Se tivermos um grau de desordem forte, as reflexões sofridas pela função de onda causam interferências destrutivas que induzem uma localização da função de onda, ou seja, a função de onda se concentra em uma pequena região e tem valor desprezível em qualquer outra região do sólido. Neste regime, o sistema está na fase isolante. A probabilidade de encontrar o elétron a uma distância  $R$  do centro da função de onda decai exponencialmente, ou seja,  $\psi(R) \propto e^{-R/\xi}$ . O parâmetro  $\xi$ , chamado de comprimento de localização, é usado para caracterizar o estado eletrônico (ver figura 1.2b). Para desordens intermediárias, o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante.

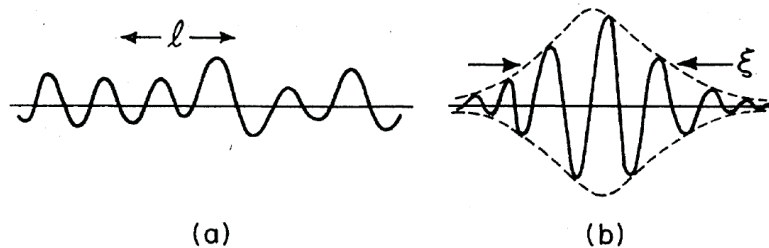


Figura 1.2: (a) Função de onda estendida - o livre caminho médio ( $l$ ) é o comprimento de coerência quando o grau de desordem é fraco. (b) Função de onda localizada -  $\xi$  mede a largura típica da função de onda, também chamado de comprimento de localização.

O Hamiltoniano do modelo de Anderson despreza a interação Coulombiana entre os elétrons, contendo somente um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos e um termo de potencial que descreve a energia de cada sítio da rede. O Hamiltoniano de Anderson, expresso numa representação de segunda quantização, é dado

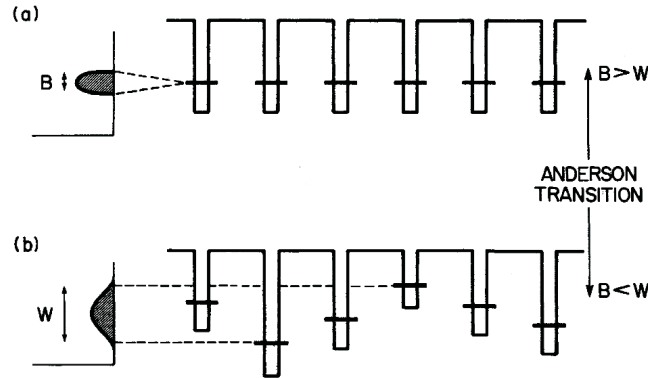


Figura 1.3: Esquema representativo para a transição de Anderson. (a) Estrutura cristalina; (b) Estrutura desordenada, com potenciais distribuídos de forma aleatória. Quando  $W > B$  temos a localização da função de onda.

por:

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (1.11)$$

onde  $\epsilon_i$  é a energia do sítio  $i$  e  $t_{ij}$  é chamado de integral de transferência entre os sítios  $i$  e  $j$ , também conhecido como a amplitude de hopping. Os termos  $c_i^\dagger$  e  $c_i$  são operadores de criação e aniquilação de elétrons no sítio  $i$ . Anderson, para introduzir o efeito de desordem, considerou as energias  $\epsilon_i$  sendo números aleatoriamente distribuídos num intervalo de largura  $W$ , sendo este último parâmetro chamado de largura da desordem. Com este modelo, Anderson mostrou a existência da chamada “localização da função de onda eletrônica”. O modelo de Anderson tridimensional apresenta uma transição metal-isolante para um valor crítico de desordem ( $W_c$ ), tornando-se metálico para  $W < W_c$ .

A solução do modelo envolve a obtenção dos auto-estados e auto-valores eletrônicos. Para a obtenção dos auto-estados eletrônicos é necessário resolver a equação de Schrödinger com um termo aleatório. Utilizando a expansão dos auto-estados nas bases de orbitais atômicos ( $\psi = \sum_i a_i \phi_i$ ), encontramos a equação de Schrödinger para o Hamiltoniano de

Anderson

$$E\psi = H\psi \quad (1.12)$$

$$Ea_i = \epsilon_i a_i + \sum_j t_{ij} a_j \quad (1.13)$$

Para melhor compreender a natureza dos estados eletrônicos, podemos analisar o modelo de Anderson, ou seja, a equação (1.13), em alguns casos limites. Vamos considerar que os potenciais sejam distribuídos sobre uma rede regular, tendo as amplitudes de hopping a mesma magnitude e existindo somente entre os  $z$  primeiros vizinhos:

$$Ea_i = \epsilon_i a_i + t \sum_{j=1}^{j=z} a_{i+j} \quad (1.14)$$

Podemos estudar o caso cristalino ( $W = 0$ ) como caso limite da equação (1.14). Considerando uma cadeia linear e fazendo as energias  $\epsilon_i$  todas iguais, que por conveniência, nós escolhemos  $\epsilon_i = 0$ , obtemos da equação (1.14):

$$Ea_i = t(a_{i-1} + a_{i+1}) \quad (1.15)$$

Observando que funções exponenciais complexas obedecem equações semelhantes a equação (1.15), escolhemos  $a_n = a_0 \exp^{ink}$  e chegamos a

$$E = 2t \cos(k) \quad (1.16)$$

Isto corresponde a banda cristalina da teoria de Bloch ( $-2t < E < 2t$ ), que para o caso de redes unidimensionais ( $z = 2$ ), a largura da banda cristalina é  $B = 4t$ .

O caráter dinâmico do sistema pode indicar a existência de estados estendidos. Considere que um elétron é colocado inicialmente ( $t = 0$ ) no sítio  $m$ . Assim temos como condição inicial  $|c_m(t = 0)|^2 = 1$  e  $|c_i(t = 0)|^2 = 0$  para  $i \neq m$ . Podemos então escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo como:

$$\frac{\hbar da_i}{i dt} = \epsilon_i a_i + \sum_i t_{ij} a_j \quad (1.17)$$

Se no limite termodinâmico, após um longo período de tempo, a probabilidade de encontrar

o elétron no sítio  $m$  for zero, ou seja,  $c_m(t \rightarrow \infty) = 0$ , o elétron é itinerante através da cadeia, caracterizando o *estado estendido*. No entanto, se  $c_m(t \rightarrow \infty) \neq 0$ , notamos que o elétron pode ser encontrado apenas nas vizinhanças de  $m$ , caracterizando o *estado localizado*. À quantidade  $|c_m(t)|^2$  chamamos de probabilidade de retorno ao ponto de partida. Uma maneira direta de obter  $|c_m(t)|^2$  é efetuar a integração numérica do conjunto de equações de movimento usando o método numérico de Runge-Kutta [38].

O problema em que  $t$  e  $W$  não são nulos foi estudado por Anderson através de teoria de perturbação, usando  $W$  como uma perturbação em um caso e  $t$  em outro. O modelo de Anderson foi de importância fundamental para compreensão e aprimoramento do conhecimento sobre transições metal-isolante que ocorrem em diversos materiais com desordem.

### 1.3.1 Teoria de Escala para a Transição de Anderson

Após a publicação de Anderson em 1958, iniciou-se uma série de estudos relacionados ao seu modelo [2, 3, 4, 5, 6]. Em 1979, Anderson, Abrahams, Licciardello e Ramakrishnan [2], apresentaram um trabalho sobre uma teoria de escala para a condutância generalizada do modelo de Anderson, no qual obtiveram a dependência da transição metal-isolante com a dimensão.

A teoria de escala propõe que uma única quantidade característica, chamada de condutância generalizada ( $g$ ), controla a transição do estado estendido para o estado localizado em  $T = 0$ . Thouless [39] usou a teoria de escala numa reformulação do modelo de Anderson. Para Thouless, as unidades fundamentais deixam de ser sítios atômicos  $i$ , passando a ser caixas de volume  $l^d$  que contêm muitos sítios. O sólido é formado de várias caixas acopladas umas às outras. As energias características do modelo de Anderson  $W$  e  $t$  são mapeadas respectivamente em  $\Delta E$  que representa o espaçamento médio entre os níveis e em  $\delta E$  que representa o deslocamento  $\delta E$  causado por mudanças nas condições de contorno.

Um elegante argumento eurístico, baseado no princípio da incerteza ( $\Delta t \Delta E \geq \hbar$ ), conecta  $\delta E$  com a condutividade  $\sigma$  no limite macroscópico

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D} \quad (1.18)$$

sendo  $t_D$  o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos

da caixa de lado  $L$ . Considerando que o elétron realiza um movimento browniano dentro da caixa, podemos escrever

$$t_D = \frac{L^2}{D} \quad (1.19)$$

sendo  $D$  a constante de difusão. Conhecendo a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão

$$\sigma = e^2 D n(E) \quad (1.20)$$

sendo  $n(E)$  a densidade de estados média, e combinando esta última com as equações (1.18) e (1.19), temos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))} \quad (1.21)$$

A densidade de estados média pode ser escrita como função do espaçamento médio entre os níveis

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E} \quad (1.22)$$

Ao tomarmos a razão  $\Delta E/\delta E$  como sendo medida da força de desordem no sistema, análoga à razão  $W/B$  no modelo de Anderson tradicional, temos:

Estados Estendidos $\Rightarrow \frac{\Delta E}{\delta E} < 1$	Sensíveis a mudanças nas condições de contorno
Estados Localizados $\Rightarrow \frac{\Delta E}{\delta E} > 1$	Não sensíveis a mudanças nas condições de contorno

O parâmetro de desordem,  $g^{-1}$ , é definido por:

$$\frac{1}{g(l)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E} \quad (1.23)$$

Ao substituirmos as equações (1.21) e (1.22) em (1.23), obtemos o comportamento de

escala do parâmetro  $g$  sendo:

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} \quad (1.24)$$

Nesta última, nota-se que o termo  $L^{d-2}\sigma$  é a condutância de um cubo (d-dimensional) de lado  $L$  e condutividade  $\sigma$ . Dessa forma, adotamos  $g(L)$  sendo a condutância generalizada expressa em unidades de  $e^2/\hbar$ . A teoria de escala está interessada na dependência de  $g(L)$  com o comprimento de escala utilizado. Consideremos  $g_0$  como a condutância generalizada para um sistema composto por caixas acopladas de volume  $L_0^d$ .

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)} \quad (1.25)$$

A teoria de escala assume que, dada a existência de uma condutância generalizada  $g_0$  para um escala de comprimento  $L_0$ , pode-se obter uma condutância generalizada  $g$  para uma escala maior  $L = L_0 b$ . Nessa nova escala, a condutância generalizada  $g$  é completamente determinada pelo valor de  $g_0$  e  $b$ , sendo este último um fator de escala. Se o fator de escala for tratado como uma transformação contínua, o comportamento de escala de  $g$  pode ser determinado pela função

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.26)$$

De forma a entendermos o comportamento de  $\beta(g)$ , analizaremos a seguir a equação (1.26).

**Quando  $\beta > 0$ :** Observamos que  $g$  cresce com o aumento de  $L$ , caracterizando um comportamento metálico. Na figura 1.4 temos o comportamento de  $\beta(g)$  para  $d = 1, 2$  e  $3$ . O comportamento qualitativo da função  $\beta(g)$  pode ser determinado tomando os seus limites assintóticos ( $g \rightarrow \infty$  e  $g \rightarrow 0$ ). Utilizando a equação (1.24), temos para  $g \rightarrow \infty$

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2 \quad (1.27)$$

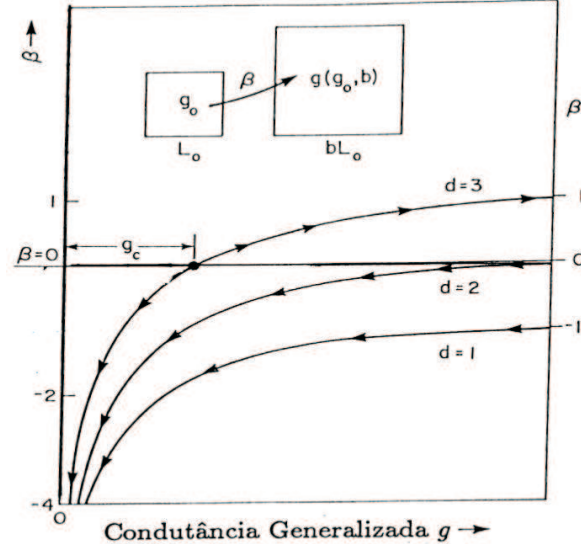


Figura 1.4: Comportamento qualitativo de  $\beta(g)$  para  $d = 1, 2$  e  $3$  na teoria de escala apresentada em [2]

ou seja,

$$\beta(\infty) = \begin{cases} +1 & \text{para } d = 3 \\ 0 & \text{para } d = 2 \\ -1 & \text{para } d = 1 \end{cases} \quad (1.28)$$

**Quando  $\beta < 0$ :** A condutância generalizada  $g(L)$  diminui com o aumento de  $L$ , terminando num regime localizado. Utilizando novamente a equação (1.24), agora para  $g \rightarrow 0$ , obtemos

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g \quad (1.29)$$

ou seja,  $\beta(g)$  se aproxima de  $-\infty$  quando  $g$  tende a zero, independente da dimensão. Para  $g$  pequeno, representando assim o limite de fraco acoplamento e forte desordem, a teoria de Anderson prevê que os estados eletrônicos sejam localizados e decaiam exponencialmente com a distância. Nos contornos de uma caixa de dimensão linear  $L$ , a amplitude da função de onda de um elétron localizado dentro da caixa é da ordem de  $e^{-\gamma L}$ , onde o

parâmetro  $\gamma$  é o coeficiente de Lyapunov<sup>2</sup>. O acoplamento entre as caixas também decai exponencialmente com  $L$ , de forma que  $g(L) \propto e^{-\gamma L}$ . Ao assumirmos que  $\beta(g)$  tenha variação lenta e monotônica entre os limites  $g \rightarrow \infty$  e  $g \rightarrow 0$ , certificamos que nossa análise anterior reproduz o comportamento qualitativo da figura 1.4. As setas do diagrama de fluxo sobre as curvas na figura 1.4 representam a direção que  $g$  varia quando  $L$  cresce. Em  $d = 3$  podemos observar um fato interessante: a existência de comportamentos distintos para  $\beta(g) < 0$  e  $\beta(g) > 0$ . Existe um ponto crítico ( $g_c$ ) no diagrama de fluxo, quando  $g = 0$ , também chamado de ponto fixo instável. Este diagrama mostra a dependência da transição de Anderson com a dimensão: em  $d = 1$  e  $d = 2$  não existe transição metal-isolante, diferentemente do caso  $d = 3$ . Foram desenvolvidos vários estudos sobre o comportamento crítico perto desta transição em  $d = 3$ , por exemplo, B. Kramer [5] utilizando a teoria de escala. Estudos sobre o comprimento de localização ( $\xi$ ) próximo da energia crítica de transição (*mobility edge*) apresentam comportamento tipo lei de potência ( $\xi \propto (E - E_c)^\nu$ ) com expoente  $\nu \approx 1.57$  [40, 41].

Apesar das muitas simplificações, o modelo de Anderson é considerado até hoje a estratégia mais eficiente para estudar os efeitos da desordem sobre propriedades de transporte eletrônico. Além disso, diversos outros fenômenos também foram explicados com base nas teorias de sistemas desordenados, como por exemplo, a ocorrência do efeito Hall quantizado. Este último está associado à presença de elétrons em estados localizados, quando o material é submetido a um campo magnético externo [42]. Podemos observar também propriedades de localização, devido a presença de desordem, em ondas mecânicas em meio líquido e em ondas eletromagnéticas [43, 44, 45]. Foram desenvolvidos vários estudos experimentais com o objetivo de comprovar a eficácia do modelo anteriormente estudado. Como exemplo das investigações da transição metal-isolante podemos citar experimentos realizados em silício dopados com fósforo ou bário [46, 47, 48, 49]. Nestes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. A largura de desordem apresentada no modelo de Anderson é devido à concentração de dopantes ( $N_p$ ) ou presença de um campo. A energia crítica do sistema ( $E_c$ ) é a concentração crítica dos dopantes ( $N_p^c$ ) ou o valor do campo ( $H_c$ ) para os quais a transição acontece. A classificação dos materiais foi escolhida da seguinte forma: aqueles que apresentavam  $\nu = 0.5$  eram os semi-condutores não-compensados; aqueles que apresentavam  $\nu = 1$  eram os semi-condutores compensados ou materiais amorfos. Porém, foram encontrados em [48],

---

<sup>2</sup>O parâmetro  $\gamma$  é também conhecido como o inverso do comprimento de localização  $\xi$ , apresentado na página 7



um expoente  $\nu = 1$  para o silício dopado com fósforo não compensado (Si : P); e em [49], um expoente  $\nu = 1.6$  para o silício dopado com Bário (Si : B), violando assim a classificação anteriormente proposta. Em geral, a diferença no expoente vem sendo atribuída à presença de outros efeitos no experimento, como por exemplo, a interação Coulombiana entre os elétrons [48]. Em sólidos reais os elétrons correlacionam seus movimentos uns com os outros de forma a evitar configurações muito energéticas. Esta interação elétron-elétron é responsável pela transição de Mott [21, 22, 23]. Na seção 1.5, apresentaremos suscintamente os estudos de Mott relacionados à influência da interação elétron-elétron no comportamento do pacote de onda eletrônico.

## 1.4 Aperiodicidade e Correlação na Desordem

A Teoria de Escala apresentada na seção 1.3.1 mostra a existência de estados localizados em sistemas  $1d$  e  $2d$  para qualquer quantidade de desordem e a possibilidade de ocorrência de uma transição metal-isolante em  $3d$ . Entretanto, uma série de trabalhos têm sido apresentados nas últimas décadas, nos quais a distribuição de desordem é feita de forma correlacionada e/ou de forma a respeitar sequências pseudo-aleatórias. A presença destes fenômenos na distribuição da desordem são responsáveis por um comportamento não previsto no modelo de Anderson  $1d$ .

Entre as décadas de 70 e 80 foram apresentados estudos de modelos que revelaram a presença de transição metal-isolante, devido à presença de potenciais incomensuráveis [12, 13, 14, 16, 15, 17, 18, 19]. Uma das características desse tipo de potencial é por apresentar um comportamento intermediário entre o caso periódico e aleatório. Em 1979, M. Ya. Azbel [12], utilizando o modelo de Kromig-Penney, demonstrou que os auto-estados desse modelo podem ser estendidos e localizados, separados por mobility edges. Foi estabelecida também uma relação entre o modelo estudado e as propriedades eletrônicas de estruturas lineares incomensuráveis conhecidas na época. Em 1980, J.B.Sokoloff [13], motivado pelo trabalho de Ya. Azbel [12], estudou a localização eletrônica num modelo tight-binding contendo um potencial incomensurável de modulação periódica, no qual a equação de Schrödinger é

$$f_{n+1} + f_{n-1} + V_0(\cos \pi qn)f_n = Ef_n \quad (1.30)$$

sendo  $f_n$  o coeficiente de expansão para a função *tight-binding* [ $\psi(x) = \sum_n f_n \phi(x - na)$ ],

enquanto  $\phi$  representa um orbital atômico. As demais grandezas estão em unidades de amplitude de hopping. A incomensurabilidade se dá ao assumirmos  $q$  como irracional. Neste trabalho foi mostrado que a teoria apresentada por Azbel prevê a existência de mobility edges próximos de  $\pm(2 - V_0)$ . O autor apresentou algumas diferenças entre os resultados obtidos para valores comensuráveis e incomensuráveis de  $q$ , além de ter mostrado que existe uma transição metal-isolante em uma dimensão para um valor crítico  $V_0$ . Em 1982, Soukoulis and Economou [14] investigaram a natureza dos auto-estados em cristais unidimensionais, sendo que o potencial para os sítios era incomensurável, similar ao modelo tratado por Sokoloff [13]. Os autores utilizaram três diferentes métodos para determinar a natureza dos auto-estados e concluíram que a presença de incomensurabilidade produz, em geral, *mobility edges* em sistemas unidimensionais. Grempel, Fishman e Prange [15] também estudaram o modelo tight-binding com hopping de primeiros vizinhos e potencial periódico diagonal que podia ser comensurável e incomensurável. O potencial utilizado por eles foi  $T_m = \tan[(\omega - m\tau)/2]$ , sendo  $\tau/2\pi$  irracional para obter a incomensurabilidade no potencial. A relação entre o modelo cujo potencial é incomensurável e modelos cujo potencial aleatório é feita através da análise da densidade de estados. Eles encontraram valores coincidentes de densidade de estados entre os modelos e propuseram investigar em quais aspectos esta similaridade manifesta-se para outros potenciais incomensuráveis. Griniasty and Fishman [16] investigaram o comprimento de localização do modelo tight-binding  $V_n u_n + u_{n+1} + u_{n-1} = E u_n$ , sendo o potencial  $V_n$  descrito pela equação a seguir.

$$\epsilon_n = V \cos k|n|^\nu \quad (1.31)$$

tendo  $k = \pi\alpha$ ,  $\alpha$  é um número irracional para que  $\epsilon_n$  seja um potencial incomensurável. Caso  $\alpha$  seja um racional e o parâmetro  $\nu$  assumo o valor  $\nu = 1$ ,  $\epsilon_n$  tomará forma de um potencial cristalino. Além disso temos o parâmetro  $V$  sendo amplitude do potencial. Um exemplo de  $\epsilon_n$  pode ser visto na figura 1.5.

Através de cálculos numéricos e usando teoria de perturbação para  $V \ll 1$ , os autores observaram uma similaridade cada vez maior entre o potencial da equação (1.31) e potenciais aleatórios, à medida que aumenta-se o valor de  $\nu$ . Constatou-se a existência de estados estendidos para  $V < 2$ , estados localizados para  $V > 2$ . Além disso, foi visto que para  $\nu \geq 2$ , todos os estados eram localizados, enquanto que para  $0 < \nu \leq 1$  existiam estados estendidos. Para  $1 < \nu < 2$  encontrou-se uma discordância entre os resultados previstos pelo método de teoria de perturbação e os resultados numéricos, tendo o autor

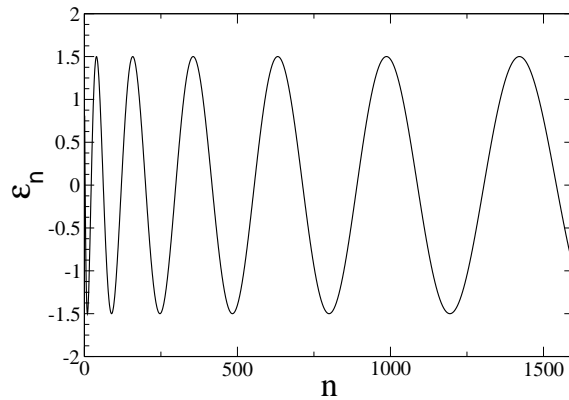


Figura 1.5: Potencial aperiódico calculado a partir da equação (1.31). Os parâmetros característicos do potencial apresentam os seguintes valores:  $V = 1.5, \pi\alpha = 1$  e  $\nu = 0.5$ .

sugerido uma maior investigação do problema.

S. Das Sarma *et al* [17], assim como Griniasty *et al* [16] e Thouless [18], investigaram a localização de um modelo *tight-binding* unidimensional, tendo o potencial regido pela equação (1.31). Os resultados apresentaram a existência de estados estendidos e localizados dependente da amplitude do potencial e dos valores de  $\nu$ .

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

Haverá estados estendidos na faixa  $-2 + V < E < 2 - V$  :

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

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

Todos os estados são localizados

- Quando  $\nu = 1$  e  $V < 2$

Todos os estados estendidos

- Quando  $\nu = 1$  e  $V > 2$

Todos os estados são localizados

- Quando  $1 < \nu < 2$ :

Todos os estados são localizados, mas o coeficiente de Lyapunov se aproxima de zero no centro da banda

- Quando  $\nu > 2$ :

O sistema se comporta como um modelo de Anderson unidimensional e todos os estados são exponencialmente localizados.

Continuando o interesse em potenciais incomensuráveis, em 1990, S. Das Sarma *et al* [19] desenvolveram uma técnica semi-clássica assintótica para calcular, no limite termodinâmico, a densidade de estados e o expoente de Lyapunov para o modelo *tight binding* unidimensional com potencial *on-site* regido pela equação (1.31). Além disso, realizaram estudos numéricos envolvendo a diagonalização direta e cálculos recursivos de matriz de transferência para compreender as propriedades de localização do modelo. Os resultados teóricos estão exatamente de acordo com os resultados numéricos, diferentemente da técnica utilizada por Griniasty and Fishman [16], que possui limitações. Neste último foi apresentado a existência de uma transição metal-isolante no modelo uni-dimensional para  $V < 2$  e  $\nu < 1$ , com os mobility edges fixos para energias  $E_c = \pm|2 - V|$ .

Como foi brevemente falado no início desta seção, a presença de correlações na distribuição da desordem também é responsável por comportamentos não previstos no modelo de Anderson *1d*. Flores [8] mostrou que o Hamiltoniano de Anderson unidimensional, tendo o potencial e amplitude de hopping aleatórios, pode apresentar uma energia crítica ( $E_c$ ), onde a transmissão (delocalização) da função de onda ocorre quando são introduzidas correlações entre as energias dos sítios e os termos de hopping. Dunlap *et.al.* [9] apresentaram um estudo sobre uma cadeia composta por uma liga binária. Nesta liga as energias dos sítios do sistema podem assumir os valores de  $\epsilon_A$  e  $\epsilon_B$ , com probabilidades  $p$  e  $1 - p$  respectivamente. Além disso, os sítios com energia  $\epsilon_A$  sempre aparecem aos pares. Se  $|\epsilon_A - \epsilon_B| \leq 2t$ , sendo  $t$  a amplitude de hopping, o sistema apresenta uma energia ressonante onde a função de onda é delocalizada. Temos também o trabalho de Moura e Lyra [10], que introduziram uma correlação de longo alcance nos elementos da diagonal do Hamiltoniano de Anderson, representando uma desordem somente nos potenciais dos sítios da cadeia. Utilizando um formalismo de grupo de renormalização, eles mostraram que este sistema pode exibir uma fase de estados estendidos no centro da banda. Pela primeira vez uma verdadeira transição metal-isolante em sistemas *1d* desordenados foi encontrada.

A comprovação experimental dos resultados apresentados até agora nesta seção não foi facilmente observada. Isso provocou um grande interesse, pois até então não se tinha certeza de sua relevância e aplicabilidade, além das suas implicações sobre propriedades físicas. Motivados por trabalhos experimentais que usaram super-redes de semicondutores (SL'S) para observar a localização eletrônica devido a desordem [50, 51], alguns autores

[52, 53, 54], usaram estes sistemas para estudar, através de métodos numéricos, as propriedades de localização e delocalização. V. Bellani *et al* [55] estudaram as propriedades eletrônicas de SL's de  $GaAs - Al_{0.35}Ga_{0.65}As$  utilizando técnicas de fotoluminescência para baixas temperaturas. A motivação dos estudos feitos por V. Bellani é decorrente da satisfatoriedade dos resultados apresentados por Chomette *et al*[50] e Zhang *et al*[51] quando comparados à cálculos teóricos. Além disso, estes últimos mostraram experimentalmente a existência de estados estendidos em sistemas com desordem de baixa dimensão com correlações de curto alcance na desordem.

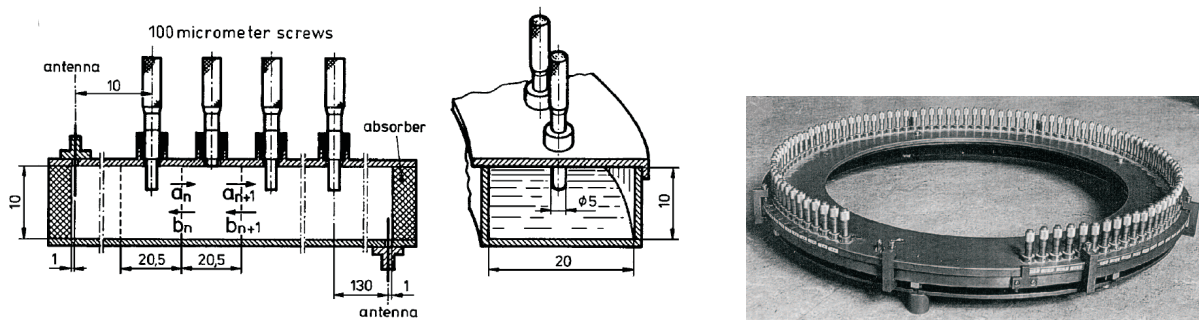


Figura 1.6: Guia de onda utilizada por Kuhl e Stöckman. Todas as dimensões estão em milímetros.

Kuhl and Stöckmann [56], utilizando um guia de onda retangular, fizeram uma analogia entre a propagação de elétrons através de um cristal e de luz através de arranjos periódicos de espalhadores. Os autores utilizaram 100 espalhadores cilíndricos, de raio  $r = 2.5mm$  e distantes de  $d = 20.5mm$ , introduzidos no guia de onda de maneira que as profundidades podiam variar, funcionando como parafusos (ver figura 1.6). Ao concluírem o trabalho, sugeriram que a transmissão e localização em estruturas aleatórias ou pseudo-aleatórias, como em [16], podem ser estudadas usando a mesma técnica. Posteriormente, Kuhl *et al* [57], explorando a analogia entre a partícula quântica e a onda eletromagnética, demonstraram a existência de *mobility edge* em  $1d$  utilizando o mesmo experimento utilizado em [56].

Na seção seguinte vamos apresentar uma descrição sucinta da física de sistemas eletrônicos interagentes. Nestes sistemas, como já foi comentado anteriormente, a presença de interação Coulombiana induz a chamada Transição de Mott.

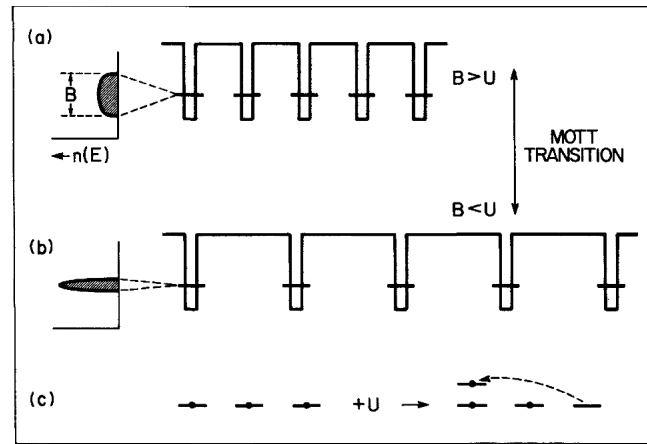


Figura 1.7: Esquema representativo para a transição de Mott. a) Quando a largura da banda cristalina  $B$  é suficientemente maior que a interação elétron-elétron  $U$ , a deslocalização é energeticamente favorável. b) quando a largura da banda cristalina  $B$  é suficientemente menor que a interação elétron-elétron  $U$ , a localização induzida por correlação acontece. c) Diagrama de dois níveis equivalente ao fator de dupla ocupação  $U$ .

## 1.5 Transição de Mott

Um dos trabalhos de maior contribuição para a física da matéria condensada foi proposto por Sir Nevill Mott. A transição de Mott [21, 22, 23], assim como na transição de Anderson anteriormente discutida, são demonstrações de situações em que a teoria de Bloch apresentada na seção 1.2, é insuficiente.

Para melhor entendermos a transição de Mott, consideraremos um sistema contendo  $N$  átomos isolados, com um único elétron de condução para cada orbital atômico. Os átomos são representados por paredes de potencial e o único elétron de valência de cada átomo ocupa um nível de energia, sendo este indicado por uma linha horizontal em cada parede atômica (ver figura 1.7). No cristal, este nível de energia dá origem a uma banda de largura  $B$ , conhecida como banda de Bloch, indo aproximadamente de  $-B/2$  à  $B/2$ . Tendo a banda somente meio preenchida, a energia média de um elétron de valência no cristal é aproximadamente  $-B/4$ . Esta diminuição na energia é responsável pela coesão metálica. No entanto, como estamos num regime metálico, podemos considerar que os elétrons tem grande mobilidade e podem ocupar quaisquer um dos orbitais do sistema, inclusive orbitais já ocupados por um elétron. O custo energético para que um átomo tenha em seu orbital dois elétrons de valência é igual a energia Coulombiana média  $U = \langle e^2/r_{12} \rangle$ .

Nas figuras 1.7a e 1.7b, a linha horizontal para cada parede representa o nível de energia do elétron de valência do átomo isolado. Este nível de energia é duplamente degenerado, e pode acomodar 2 elétrons de spins opostos. Sendo assim, um mesmo nível pode ser ocupado por zero, um ou dois elétrons. Porém, quando 2 elétrons ocupam o mesmo sítio, nós temos a interação repulsiva aumentando a energia. Isto pode ser visto na figura 1.7.c. Dois níveis de energia são associados para cada sítio. O nível inferior, correspondente ao nível usado nas figuras 1.7a e 1.7b, está disponível para o primeiro elétron à ocupar o orbital atômico. O nível superior, qual realmente existe somente quando o nível mais baixo está preenchido, é elevado pela quantia  $U$  e está disponível para um segundo elétron ocupar o sítio.

No tratamento de elétrons independentes, quando se despreza a existência de interação, as funções de onda são as funções de Bloch em que cada elétron apresenta igual probabilidade de ocupar um dado sítio. Devido a presença de interação, as probabilidades de obtermos um orbital atômico vazio, com um único elétron e com 2 elétrons é respectivamente  $1/4$ ,  $1/2$  e  $1/4$ . Desta forma, como o custo energético médio para duplas ocupações é  $U/4$ , a energia média de um elétron delocalizado é:  $-B/4 + U/4$ . A transição metal-isolante induzida por interação elétron-elétron é oriunda da competição entre o abaixamento médio da energia ( $B/4$ ) - ocasionado pela delocalização; e o custo de correlação devido às duplas ocupações. Se  $-B/4 + U/4$  for maior que a energia média de um elétron localizado, a delocalização é uma configuração energeticamente desfavorável. Assim, a condição para se obter um isolante de Mott, ou uma localização induzida dos pacotes de onda eletrônicos é:

$$U > B \quad (1.32)$$

Pelos estudos teóricos fundamentais das estruturas eletrônicas magnéticas e de sistemas desordenados, Mott, juntamente com P. W. Anderson e J. H. van Vleck ganharam o Prêmio Nobel de Física de 1977.

## 1.6 Modelo de Hubbard

Historicamente, De Boer and Vernwey foram os primeiros a destacar em 1937 que o NiO na estrutura NaCl deveria ser metálica, já que os níveis de Fermi diminuem no meio da banda Ni-3d. Este fato pôs uma grande dificuldade nos cálculos de bandas de um elétron naquele tempo, visto que o NiO é conhecido como sendo um isolante, tendo uma

lacuna na banda de alguns eV. Peirels notou no mesmo ano que esta dificuldade é devido ao fato de desprezar a interação repulsiva entre os elétrons e que a interação elétron-elétron deve ser tratada além da aproximação de um elétron de Hartree-Fock [22]. Hubbard [20] propôs um modelo capaz de descrever os estados eletrônicos estendidos - esperados da teoria de bandas; e estados localizados, dominados pela energia Coulombiana no sítio. O Hamiltoniano de Hubbard é escrito como:

$$H = -t \sum_{i,j} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1.33)$$

onde  $c_{i\uparrow}^\dagger$  é o operador criação de um elétron com *spin up* para o sítio  $i$  e  $c_{j\downarrow}$  é o operador aniquilação de um elétron com *spin down* no sítio  $j$ . O segundo termo do Hamiltoniano indica que a energia do sistema é aumentada de  $U$  quando os dois elétrons de spins opostos estiverem no mesmo orbital<sup>3</sup>. O parâmetro  $U$  é chamado de energia de Coulomb sobre o sítio. O parâmetro  $t$  no primeiro termo do Hamiltoniano é chamado de integral de transferência ou amplitude de *hopping* e representa a energia cinética envolvida sobre a transferência de um elétron do sítio  $j$  para o sítio vizinho  $i$  sem mudar sua orientação de spin. Veremos a seguir que o modelo de Hubbard é utilizado como um modelo apropriado para descrever o movimento de elétrons de condução sujeitos a uma interação repulsiva Coulombiana.

## 1.7 Interação entre Duas Partículas

Os modelos e resultados apresentados nas seções 1.2,1.3 e 1.4 foram desenvolvidos considerando elétrons não interagentes, ou seja, não foi considerada a influência da interação Coulombiana. O modelo apresentado na seção 1.6 tem sido muito utilizado para descrever a competição entre os efeitos de desordem e interação eletrônica. D. L. Shepelyansk [24] foi o primeiro a considerar a interação de Hubbard entre duas partículas sob um potencial aleatório. Seus estudos mostram que a influência da interação é pequena sempre que as partículas estejam suficientemente distantes, quando comparadas ao comprimento de localização de uma única partícula. Entretanto, quando as duas partículas estão separadas por uma distância próxima ao comprimento de localização de uma partícula, independentemente do sinal de interação, existe a possibilidade de propagação das

---

<sup>3</sup>Usamos elétrons com spin up e spin down devido ao princípio da exclusão de Pauli.



duas partículas movendo-se coerentemente. Seu comprimento de localização ( $\xi_2$ ) é muito maior que o comprimento de localização de uma partícula ( $\xi_1$ ), obedecendo uma lei de escala  $\xi_2 \propto \xi_1^2$ . Outros autores [25, 26] apresentaram resultados que concordam com Shepelyansk, mostrando que a interação entre os dois elétrons pode provocar uma propagação coerente entre os mesmos.

Consideremos dois elétrons, de spins opostos, numa cadeia aleatória de  $N$  sítios. Temos  $N$  estados nos quais os dois elétrons mudam suas propriedades de localização, devido à dupla ocupação. Os outros  $N(N-1)$  estados permanecem como no caso de elétrons não interagentes. Pensando nisto, Evangelou *et al* [27], considerando uma cadeia desordenada finita com dois elétrons interagentes, utilizaram a técnica de diagonalização exata para mostrar a existência de estados que sofrem pouca influência da interação, com os dois elétrons separados um do outro. Relatou-se também a existência de estados em que comprimento de localização é aumentado pela interação e estados cujo comprimento de localização diminui devido a interação. S. N. Evangelou e D. E. Katsanos [28], considerando dois elétrons de spins opostos interagindo numa cadeia quasi-periódica, estudaram os efeitos da interação de Hubbard sobre os auto-estados de um elétron. Os autores utilizaram o modelo de Harper-Hubbard, descrito pelo Hamiltoniano a seguir, para estudar numericamente a influência da interação de Hubbard.

$$H = \sum_{n=1} \sum_{\sigma} (c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma}) + \sum_{n=1} \sum_{\sigma} \lambda \cos(2\pi\phi n) c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1} U c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow} c_{n,\downarrow} \quad (1.34)$$

sendo  $c_{n,\sigma}^{\dagger}$  e  $c_{n,\sigma}$  os operadores de criação e aniquilação para um elétron no sítio  $n$  com spin  $\sigma$ .  $\lambda \cos(2\pi\phi n)$  é o potencial no sítio  $n$  e  $U$  é a energia de interação local de Hubbard entre os dois elétrons. O modelo Harper-Hubbard apresenta uma transição metal-isolante para o caso não interagente. Na presença de interação, eles notaram para o regime localizado, uma forte localização para altos valores de  $U$ , assim como em sistemas desordenados [27].

P. E. Brito, E. S. Rodrigues e H. N. Nazareno [29] se interessaram também em sistemas de dois elétrons interagentes de spins opostos. Os autores consideraram estes elétrons em um sistema aperiódico de Fibonacci e de Thue-Morse e a interação entre os elétrons era representado pelo modelo de Hubbard. Concluíram em seu trabalho que ambas estruturas, Fibonacci e Thue-Morse, apresentam uma propagação superdifusiva do pacote de onda eletrônico, observando um aumento da propagação proporcional à medida

que a interação aumenta.

Nesta seção vimos alguns dos vários trabalhos existentes sobre dois elétrons interagentes. Grande parte considera os dois elétrons possuindo spins opostos, visto que a dupla ocupação é permitida para esta configuração. No entanto, observa-se na literatura a existência de duas abordagens no estudo de sistema de dois elétrons interagentes. Elas diferenciam-se na forma de escrever a função de onda eletrônica. Em uma, os elétrons possuem os mesmos estados de spin, sendo espacialmente indistinguíveis. A outra abordagem se refere aos elétrons como sendo distinguíveis. Baseados na existência das oscilações de Bloch [36, 58, 59] em sistemas unidimensionais [34, 35], apresentaremos nos próximos capítulos estudos de dois elétrons interagentes numa rede unidimensional, sob influência de um campo elétrico uniforme e constante e direcionado paralelamente à cadeia. Devido a existência de duas abordagens utilizadas no estudo de elétrons interagentes, discutiremos a seguir as características de cada uma, visando o melhor entendimento dos resultados que serão apresentados no terceiro capítulo.

## Capítulo 2

# Dois Elétrons Interagentes Sob Influência de Campo Elétrico Uniforme

### 2.1 Introdução

Como foi dito no capítulo anterior, a interação entre dois elétrons possui grande relevância no comportamento de sistemas eletrônicos, podendo induzir também uma transição metal-isolante. Dentro do contexto de sistemas com dois elétrons interagentes, a literatura apresenta duas abordagens distintas para se estudar as propriedades de transporte eletrônico. Uma abordagem, que chamaremos de (A1), considera que os elétrons tenham o mesmo estado de spin. Dessa forma, a função de onda dos dois elétrons de spins opostos deve obedecer o Postulado da Simetrização da mecânica quântica, sendo então anti-simétrica em relação a troca de partículas [26, 27, 28]. A outra abordagem, que chamaremos de (A2), trata os elétrons do sistema como distinguíveis pelo spin [29, 30]. Neste capítulo vamos apresentar uma revisão das abordagens bem como o formalismo necessário para se extrair as propriedades eletrônicas de interesse. Além deste aspecto, vamos apresentar o Hamiltoniano para dois elétrons interagentes na presença de um campo elétrico constante e paralelo à cadeia. Elétrons não interagentes na presença de um campo externo apresentam um comportamento oscilatório chamado oscilações de Bloch [33, 34, 35, 37, 58, 59]. Como mostraremos neste capítulo, este fenômeno pode ser explicado utilizando argumentos semi-clássicos [36].

### 2.1.1 Sistemas de partículas idênticas

A distinção essencial entre um ensemble de partículas *fermiônicas* (partículas que satisfazem a estatística de Fermi-Dirac) e um ensemble de partículas *bosônicas* (partículas que satisfazem a estatística de Bose-Einstein) é a natureza das autofunções. No caso de bósons, as autofunções são totalmente simétricas sobre troca de quaisquer duas partículas, enquanto que para férmions, as autofunções são totalmente anti-simétricas sobre troca de quaisquer duas partículas. Do ponto de vista matemático, a representação desta afirmação acima é:

$$\begin{aligned} P_{ij}|N \text{ bósons idênticos}\rangle &= |N \text{ bósons idênticos}\rangle \\ P_{ij}|N \text{ férmions idênticos}\rangle &= -|N \text{ férmions idênticos}\rangle \end{aligned} \quad (2.1)$$

sendo  $P_{ij}$  o operador de permutação que troca a  $i$ -ésima e a  $j$ -ésima partícula, sendo  $i$  e  $j$  arbitrários. Isto é conhecido como o Postulado da Simetrização, que considera a existência de duas categorias de partículas na natureza: partículas de spin semi-inteiro (elétrons, pósitrons, prótons, múons, etc.) - são férmions; e partículas de spin inteiro (fótons, mésons, etc.) - são bósons.

O Postulado da Simetrização requer que férmions obedeçam o princípio da exclusão de Pauli, que nos diz que dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico. O princípio da exclusão foi formulado inicialmente de maneira a explicar as propriedades de átomos de vários elétrons. Previsões baseadas neste princípio têm sido sempre confirmadas experimentalmente.

Para ilustrar a diferença entre férmions e bósons, consideremos duas partículas, cada qual podendo ocupar somente dois estados, caracterizados por  $k'$  e  $k''$ . Para um sistema de dois férmions existe somente um estado possível

$$|k'\rangle|k''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle) \quad (2.2)$$

Para bósons, existem três estados possíveis

$$\begin{aligned} |k'\rangle|k''\rangle &= |k'\rangle|k'\rangle \\ |k'\rangle|k''\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle) \\ |k'\rangle|k''\rangle &= |k''\rangle|k''\rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para uma melhor compreensão, faremos na equações (2.2) a permutação entre os estados  $k'$  e  $k''$ , obtendo

$$|k''\rangle|k'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k''\rangle|k'\rangle - |k'\rangle|k''\rangle) \quad (2.4)$$

$$|k''\rangle|k'\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle) \quad (2.5)$$

Nota-se que esta última equação satisfaz o Postulado de Simetrização apresentado na equação (2.1). As equações (2.3) podem ser verificadas da mesma forma.

Consideremos agora um sistema de dois elétrons. Na ausência de acoplamento entre o spin e a posição, podemos separar as coordenadas de spin e posição. Assumir que não há acoplamento entre spin e posição é dizer que a probabilidade de obter spin up, por exemplo, é independente da localização da partícula. Desse modo podemos expressar a função de onda para um sistema de dois elétrons como:

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) \quad (2.6)$$

com a função de spin podendo ser

$$\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) = \begin{cases} \text{simétrica (triplete)} & \begin{cases} \chi_{++} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) \\ \chi_{--} \end{cases} \\ \text{anti-simétrica (singleto)} & \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+}) \end{cases} \end{cases} \quad (2.7)$$

onde  $\chi_{+-}$  corresponde à  $\chi(m_{s_1} = \frac{1}{2}, m_{s_2} = -\frac{1}{2})$ . Pelo Postulado de Simetrização, a distribuição de Fermi-Dirac requer para a função de onda dos dois elétrons se comporte como:

$$\psi(\mathbf{x}_1, m_{s_1}; \mathbf{x}_2, m_{s_2}) = -\psi(\mathbf{x}_2, m_{s_2}; \mathbf{x}_1, m_{s_1}) \quad (2.8)$$

Analizando as permutações espaciais e de spin separadas

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \rightarrow \phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \quad \chi(m_{s_1}, m_{s_2}) \rightarrow \chi(m_{s_2}, m_{s_1}) \quad (2.9)$$

podemos ver que a equação (2.8) é satisfeita somente se a parte espacial simétrica(anti-simétrica) da função de onda for combinada com parte de spin anti-simétrica(simétrica).

## 2.2 Dois Elétrons em um Sólido Linear

Consideremos agora dois elétrons numa rede unidimensional de  $N$  sítios. Para isso apresentamos o Hamiltoniano de Anderson-Hubbard

$$H = J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} \quad (2.10)$$

onde  $c_{n,\sigma}^{\dagger}$  e  $c_{n,\sigma}$  são os operadores criação e aniquilação de férmions respectivamente, para um elétron situado no sítio  $n$  com spin  $\sigma = \pm 1/2$ . O parâmetro  $\bar{U}$  é a força de interação local de Hubbard entre os dois elétrons. Temos o parâmetro  $\bar{\epsilon}_n$  representando a energia para o sítio  $n$  e  $J$  o termo de hopping.

Apresentaremos a seguir duas abordagens encontradas na literatura, tendo cada qual uma particularidade física presente a ser considerada.

### 2.2.1 Abordagem I (A1)

De acordo com a literatura [26, 27, 28, 60], a parte espacial da função de onda eletrônica é do tipo

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\omega_A(x_1)\omega_B(x_2) + \omega_A(x_2)\omega_B(x_1)] \quad (2.11)$$

ou seja, os elétrons são espacialmente indistinguíveis. Para melhor entendermos, consideremos que a probabilidade de encontrarmos uma partícula é independente do spin. Desse modo, 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  $\mathbf{x}_2$  é dada por

$$|\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 = \frac{1}{2} \{ |\omega_A(x_1)|^2 |\omega_B(x_2)|^2 + |\omega_A(x_2)|^2 |\omega_B(x_1)|^2 \pm 2Re [\omega_A(x_1)\omega_B(x_2)\omega_A^*(x_2)\omega_B^*(x_1)] \} d^3x_1 d^3x_2 \quad (2.12)$$

onde o sinal  $+$ ( $-$ ) são respectivamente para as funções simétricas(anti-simétricas) espacialmente. Se estivéssemos considerando nosso sistema no sub-espço de spin tripleto, teríamos a parte espacial da função de onda anti-simétrica, e conforme foi mostrado na última equação, não poderíamos observar dois elétrons no mesmo ponto no espaço, impossibilitando observar o fenômeno de interação de Hubbard que é um de nossos interesses.

Nesta abordagem, o espaço de Hilbert de dois elétrons pode ser dividido em um sub-espço de singleto, com spin total  $S = 0$  e em um sub-espço de tripleto com spin total  $S = 1$ , tendo as componentes  $S_z = 1, 0$  e  $-1$ . Para que o efeito da interação on-site de Hubbard entre elétrons seja observado, é necessário considerar que os elétrons tenham spins opostos. Num sistema constituído de  $N$  sítios, o sub-espço de singleto é expandido nas bases de  $N(N + 1)/2$  funções de onda espacialmente simétricas

$$|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1} \sum_{n_2} f_{n_1, n_2} |\psi(n_1, n_2)\rangle \quad (2.13)$$

Utilizando notação de segunda quantização e considerando que o estado de spin seja estático, obtemos os seguintes vetores de base

$$|\psi(n_1, n_2)\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{n_1, \uparrow}^\dagger c_{n_2, \downarrow}^\dagger + c_{n_2, \uparrow}^\dagger c_{n_1, \downarrow}^\dagger) |0, 0\rangle & \text{se } n_2 > n_1 \\ c_{n_1, \uparrow}^\dagger c_{n_1, \downarrow}^\dagger |0, 0\rangle & \text{se } n_2 = n_1 \end{cases} \quad (2.14)$$

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

Para se estudar o comportamento estático dos dois elétrons, precisamos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

$$H|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = E|\psi(n_1, n_2)\rangle_s \quad (2.15)$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
H|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( c_{n+1, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma} + c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n+1, \sigma} \right)}_{H_1} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma}}_{H_2} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow}}_{H_3} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s
\end{aligned} \tag{2.16}$$

onde foi feito a identificação de cada termo do Hamiltoniano para facilitar os cálculos posteriores da resolução da equação de Schrödinger. Para resolvermos a equação (2.15) se faz necessário escrever o Hamiltoniano na forma matricial.

Consideremos primeiramente que os dois elétrons estejam no mesmo orbital atômico, ou seja,  $n_1 = n_2$ . Assim, para  $H_1$ :

$$H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} + c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n+1, \downarrow} \right) c_{n_1, \uparrow}^{\dagger} c_{n_1, \downarrow}^{\dagger} |0, 0\rangle \tag{2.17}$$

Devido a atuação dos operadores de criação e aniquilação de férmions, temos:

$$\begin{aligned}
H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} + c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n+1, \downarrow} \right) |n_1, \uparrow, n_1, \downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( |n_1 + 1_{\uparrow}, n_1, \downarrow\rangle + |n_1, \uparrow, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{|n_1 - 1_{\uparrow}, n_1, \downarrow\rangle}_{\text{wavy}} + \underbrace{|n_1, \uparrow, n_1 - 1_{\downarrow}\rangle}_{\text{wavy}} \right)
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Observando os termos destacados e comparando-os com a equação (2.14), podemos res-



crever a equação anterior como:

$$H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \sqrt{2} |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle + \sqrt{2} |\psi(n_1 - 1, n_1)\rangle \right) \quad (2.19)$$

Para  $H_2$ :

$$H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\ &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1} \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} 2 \bar{\epsilon}_{n_1} |\psi(n_1, n_1)\rangle \quad (2.22)$$

Fazendo agora os cálculos para  $H_3$ .

$$H_3|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \quad (2.23)$$

Ao analisarmos a equação (2.23) e recordando da seção(1.6), onde apresentamos a energia de interação de Hubbard sendo *on-site*, temos que

$$H_3|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \bar{U} |\psi(n_1, n_1)\rangle \quad (2.24)$$

somente se  $n_2 = n_1$ .

De posse das equações (2.19), (2.22) e (2.24), reescrevemos a equação de Schrödin-

ger independente do tempo para elétrons dispostos em sítios iguais como

$$\begin{aligned}
 E|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( \sqrt{2} |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle + \sqrt{2} |\psi(n_1 - 1, n_1)\rangle \right) \right. \\
 &\quad \left. + \left( 2 \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{U} \right) |\psi(n_1, n_1)\rangle \right]
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

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

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} + c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow} \right) \\
 &\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( c_{n_1, \uparrow}^\dagger c_{n_1+1, \downarrow}^\dagger + c_{n_1+1, \uparrow}^\dagger c_{n_1, \downarrow}^\dagger \right) |0, 0\rangle
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

fazendo novamente uso dos operadores de criação e aniquilação de férmions temos

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} + c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow} \right) \\
 &\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
 H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \underline{|n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle} + \underline{|n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle} + \underline{|n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle} \right) \right. \\
 &\quad + \underline{|n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle} + \underline{|n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle} + |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\
 &\quad \left. + |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle + \underline{\underline{|n_1 + 1_\uparrow, n_1 - 1_\downarrow\rangle}} \right]
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Observando os termos destacados, podemos reescrever a equação anterior como

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \sqrt{2} |\psi(n_1 + 1, n_1 + 1)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \right. \\
 &\quad \left. + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 1)\rangle + \sqrt{2} |\psi(n_1, n_1)\rangle \right)
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

Para  $H_2$ .

$$\begin{aligned}
H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
&= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \bar{\epsilon}_{n_1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right. \\
&\quad \left. + \bar{\epsilon}_{n_1+1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right] \quad (2.29)
\end{aligned}$$

$$H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1} \right) |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \quad (2.30)$$

Como  $H_3$ , onde temos a força de interação de Hubbard, é somente para elétrons no mesmo sítio, concluímos através das equações (2.28)(2.30) que a equação de Schrödinger para  $n_2 = n_1 + 1$  é

$$\begin{aligned}
E|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( \sqrt{2} |\psi(n_1 + 1, n_1 + 1)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle + \sqrt{2} |\psi(n_1, n_1)\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 1)\rangle \right) + \left( \epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1} \right) |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \right] \quad (2.31)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} + c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow} \right) \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
&= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \underline{|n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow\rangle} + \underline{|n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle} \right) \right. \\
&\quad + \underline{|n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle} + \underline{|n_1 + 2_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle} + \underline{|n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow\rangle} \\
&\quad \left. + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + \underline{|n_1 + 2_\uparrow, n_1 - 1_\downarrow\rangle} \right] \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Ao observar os termos destacados, podemos reescrever a última equação como

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( |\psi(n_1 + 1, n_1 + 2)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle \right. \\
 &\quad \left. + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 2)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \right)
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Para  $H_2$ :

$$\begin{aligned}
 H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
 &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \bar{\epsilon}_{n_1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right. \\
 &\quad \left. + \bar{\epsilon}_{n_1+2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right]
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

$$H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+2} \right) |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \tag{2.35}$$

Utilizando as equações (2.33) e (2.35) para escrever a parte da equação de Schrödinger independente do tempo para  $n_2 = n_1 + 2$ , obtemos

$$\begin{aligned}
 E|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1, n_1 + 2)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 2)\rangle \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \right) + \left( \epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2} \right) |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \right]
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Tomando agora que  $n_2 = n_1 + 3$ , para  $H_1$ :

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} + c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow} \right) \\
 &\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right)
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

$$\begin{aligned}
H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 3_\downarrow\rangle + \underbrace{|n_1 + 4_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle}_{\text{wavy}} + \underbrace{|n_{1\uparrow}, n_1 + 4_\downarrow\rangle}_{\text{wavy}} \right) \right. \\
&+ \underbrace{|n_1 + 3_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle}_{\text{wavy}} + \underbrace{|n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 3_\downarrow\rangle}_{\text{wavy}} + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \\
&\left. + |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + \underbrace{|n_1 + 3_\uparrow, n_1 - 1_\downarrow\rangle}_{\text{wavy}} \right] \quad (2.38)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_1|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= J \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( |\psi(n_1 + 1, n_1 + 3)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 4)\rangle \right. \\
&\left. + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 3)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \right) \quad (2.39)
\end{aligned}$$

Para  $H_2$ :

$$\begin{aligned}
H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
&= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \bar{\epsilon}_{n_1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right. \\
&\left. + \bar{\epsilon}_{n_1+3} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right] \quad (2.40)
\end{aligned}$$

$$H_2|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+3} \right) |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle \quad (2.41)$$

Assim, com a finalidade de obtermos a equação de Schrödinger independente do tempo para  $n_2 = n_1 + 3$ , utilizamos as equações (2.39) e (2.41) para escrever

$$\begin{aligned}
E|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1, n_1 + 3)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 4)\rangle + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 3)\rangle \right. \right. \\
&\left. \left. + |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \right) + \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+3} \right) |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle \right] \quad (2.42)
\end{aligned}$$

Como dito anteriormente, para que possamos estudar os estados eletrônicos do sistema é necessário escrever o Hamiltoniano na sua forma matricial. Considerando nas equações (2.25), (2.31), (2.36) e (2.42) somente os termos não nulos dos somatórios, e

introduzindo as grandezas adimensionais

$$\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{J}, \quad U = \frac{\bar{U}}{J} \quad e \quad \mathcal{E} = \frac{E}{J} \quad (2.43)$$

reescrevemos as equações de Schrödinger independente do tempo como

$$\mathcal{E} f_{n_1, n_1} = \sqrt{2} f_{n_1, n_1+1} + \sqrt{2} f_{n_1-1, n_1} + f_{n_1, n_1} (2\epsilon_{n_1} + U) \quad (2.44)$$

para  $n_1 = n_2$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{E} f_{n_1, n_1+1} &= \sqrt{2} f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + \sqrt{2} f_{n_1, n_1} \\ &+ f_{n_1-1, n_1+1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1}) f_{n_1, n_1+1} \end{aligned} \quad (2.45)$$

para  $n_2 = n_1 + 1$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{E} f_{n_1, n_1+2} &= f_{n_1+1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+3} + f_{n_1-1, n_1+2} \\ &+ f_{n_1, n_1+1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2}) f_{n_1, n_1+2} \end{aligned} \quad (2.46)$$

para  $n_2 = n_1 + 2$ , e para  $n_2 = n_1 + 3$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} f_{n_1, n_1+3} &= f_{n_1+1, n_1+3} + f_{n_1, n_1+4} + f_{n_1-1, n_1+3} \\ &+ f_{n_1, n_1+2} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+3}) f_{n_1, n_1+3} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Observando as equações (2.45)(2.46) e (2.47) podemos dizer que para qualquer  $n_2 > n_1 + 1$ , a equação de Schrödinger independente do tempo é:

$$\mathcal{E} f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2}) f_{n_1, n_2} \quad (2.48)$$

As equações (2.44)(2.45) e (2.48) são relações de recorrência para as amplitudes de probabilidade  $f_{l,k}$  que foram derivadas da equação de Schrödinger. Elas serão utilizadas para que possamos obter a representação matricial do Hamiltoniano  $H$  na base  $(|\psi(n_1, n_2)\rangle \dots |\psi(n_N, n_N)\rangle)$ . Por exemplo, numa cadeia com 4 sítios, o espaço de Hilbert no sub-espaço de singlete é expandido em  $(4 \cdot 5)/2 = 10$  funções de onda espacialmente simétricas. Neste caso, utilizamos as equações (2.44)(2.45) e (2.48) para escrevemos o

Hamiltoniano na sua forma matricial como:

$$H = \begin{pmatrix} 2\epsilon_1 + U & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2\epsilon_2 + U & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \sqrt{2} & \epsilon_2 + \epsilon_3 & 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_2 + \epsilon_4 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 2\epsilon_3 + U & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \sqrt{2} & \epsilon_3 + \epsilon_4 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 2\epsilon_4 + U \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

A diagonalização do Hamiltoniano do sistema,

$$\det(H - \lambda I) = 0 \quad (2.50)$$

pode ser feita através de rotinas numéricas apropriadas. No nosso estudo utilizamos a biblioteca LAPACK de rotinas de álgebra linear. Através das auto-energias e auto-estados encontrados podemos estudar funções que descrevam o caráter estático dos auto-estados do problema. Um exemplo disso é a razão de participação  $\zeta$  [5]

$$\zeta = \frac{\sum_j |f_{n_1, n_2}|^2}{\sum_j |f_{n_1, n_2}|^4} \quad (2.51)$$

utilizada para medir o grau de localização do sistema. No próximo capítulo, quando apresentaremos nossos resultados, discutiremos grandezas relevantes na caracterização do sistema, obtidas através da diagonalização do Hamiltoniano do sistema.

### 2.2.2 Abordagem II (A2)

Assim como Brito *et al* [29], Römer e Schreiber [30], consideramos que os elétrons sejam distinguíveis. Dessa forma, a parte espacial da função de onda é:

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \omega_A(x_1)\omega_B(x_2) \quad (2.52)$$

Considerando que a probabilidade de encontrarmos uma partícula seja independente do spin, temos que a probabilidade de encontrarmos o elétron 1 em  $d^3x_1$  em torno de  $\mathbf{x}_1$  e o elétron 2 em  $d^3x_2$  em torno de  $\mathbf{x}_2$  é dado por

$$|\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 = |\omega_A(x_1)|^2 |\omega_B(x_2)|^2 \quad (2.53)$$

Sendo a nossa cadeia constituída de  $N$  sítios, estudaremos os auto-estados do Hamiltoniano no sub-espço gerado por todos os estados de posição dos dois elétrons, ou seja, nosso sub-espço será expandido em  $N^2$  funções de onda

$$|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1s}} \sum_{n_{2s'}} f_{n_{1s}, n_{2s'}} |\psi(n_{1s}, n_{2s'})\rangle \quad (2.54)$$

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

$$|\psi(n_{1s}, n_{2s'})\rangle = c_{n_1, \uparrow}^\dagger c_{n_2, \downarrow}^\dagger |0, 0\rangle \quad (2.55)$$

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

Assim, como feito em A1, resolveremos a seguir a equação de Schrödinger independente do tempo

$$H|\Psi(n_1, n_2)\rangle = E|\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (2.56)$$

para estudarmos os aspectos estáticos dos dois elétrons. De posse do Hamiltoniano 2.10, reescrevemos a última equação como:

$$\begin{aligned} H|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( c_{n+1, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma} + c_{n, \sigma}^\dagger c_{n+1, \sigma} \right)}_{H_4} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\ &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_n c_{n, \sigma}^\dagger c_{n, \sigma}}_{H_5} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \end{aligned} \quad (2.57)$$



$$+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}}_{H_6} |\Psi(n_1, n_2)\rangle$$

Visando encontrar uma relação de recorrência para este problema, assim como feito para A1, tomamos inicialmente os dois elétrons no mesmo orbital atômico, ou seja,  $n_1 = n_2$ . Assim, para  $H_4$ :

$$\begin{aligned} H_4 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow} \right) c_{n_{1,\uparrow}}^\dagger c_{n_{1,\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle \end{aligned} \quad (2.58)$$

Devido a atuação dos operadores de criação e aniquilação de férmions, temos:

$$\begin{aligned} H_4 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow} \right) |n_{1,\uparrow}, n_{1,\downarrow}\rangle \end{aligned} \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} H_4 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle \right. \\ &\quad \left. + |n_1 - 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 - 1_\downarrow\rangle \right) \end{aligned} \quad (2.60)$$

Reescrevemos a equação anterior como:

$$\begin{aligned} H_4 |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( |\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle \right. \\ &\quad \left. + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_\downarrow)\rangle \right) \end{aligned} \quad (2.61)$$

Para  $H_5$ :

$$H_5|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (2.62)$$

$$\begin{aligned} H_5|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\ &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1} \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \end{aligned} \quad (2.63)$$

$$H_5|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} 2 \bar{\epsilon}_{n_1} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \quad (2.64)$$

Fazendo agora os cálculos para  $H_6$  temos:

$$H_6|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \quad (2.65)$$

Ao analisarmos a equações (2.65) e recordando da seção(1.6), onde apresentamos a energia de interação de Hubbard sendo *on-site*, temos que

$$H_6|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \bar{U} |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \quad (2.66)$$

somente se  $n_2 = n_1$ .

De posse das euações (2.61), (2.64) e (2.66), reescrevemos a parte da equação de Schrödinger independente do tempo para elétrons dispostos em sítios iguais como:

$$\begin{aligned} E|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle \right) + (2 \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{U}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right] \end{aligned} \quad (2.67)$$

Considerando agora que  $n_2 = n_1 + 1$ . Para  $H_4$ :

$$\begin{aligned} H_4|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right. \\ &\quad \left. + c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow} \right) c_{n_{1\uparrow}}^\dagger c_{n_{1+1\downarrow}} |0, 0\rangle \end{aligned} \quad (2.68)$$

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

$$\begin{aligned} H_4|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right. \\ &\quad \left. + c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n+1, \downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} H_4|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( |n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle \right. \\ &\quad \left. + |n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \right) \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} H_4|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( |\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow)\rangle \right. \\ &\quad \left. + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right) \end{aligned} \quad (2.71)$$

A seguir faremos os cálculos para  $H_5$ .

$$\begin{aligned} H_5|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle \\ &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1} \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle \end{aligned} \quad (2.72)$$

Como visto anteriormente,  $H_6$  possui o termo de interação de Hubbard, existindo somente para elétrons no mesmo sítio. Desta forma, concluímos através das equações (2.71) e (2.72) que a parte da equação de Schrödinger para  $n_2 = n_1 + 1$  é:

$$\begin{aligned}
E|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) + \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1} \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right] \quad (2.73)
\end{aligned}$$

Tomando agora que  $n_2 = n_1 + 2$ , para  $H_4$ :

$$\begin{aligned}
H_4|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( c_{n+1, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n+1, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} \right. \\
&\quad \left. + c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n+1, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n+1, \downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( |n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow}\rangle \right. \\
&\quad \left. + |n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle \right) \quad (2.74)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_4|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \right. \\
&\quad \left. + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) \quad (2.75)
\end{aligned}$$

Para  $H_5$ ,

$$\begin{aligned}
H_5|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \bar{\epsilon}_n \left( c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+2} \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \quad (2.76)
\end{aligned}$$

Sabendo que  $H_6$  não é válido para este caso e tendo em mãos as equações (2.75)(2.76),

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

$$\begin{aligned}
E|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \right. \right. \\
&+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \left. \left. \right) \right. \\
&+ \left. \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + \bar{\epsilon}_{n_1+1} \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \right] \quad (2.77)
\end{aligned}$$

Para que possamos escrever o Hamiltoniano em sua forma matricial, consideremos nas equações (2.67)(2.73) e (2.77) somente os termos não nulos dos somatórios. Acrescentamos também as grandezas adimensionais

$$\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{J}, \quad U = \frac{\bar{U}}{J} \quad e \quad \mathcal{E} = \frac{E}{J} \quad (2.78)$$

de forma a reescrever as equações de Schrödinger como

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_1} = f_{n_1+1, n_1} + f_{n_1, n_1+1} + f_{n_1-1, n_1} + f_{n_1, n_1-1} + (2\epsilon_{n_1} + U)f_{n_1, n_1} \quad (2.79)$$

para  $n_1 = n_2$

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_1+1} = f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + f_{n_1-1, n_1+1} + f_{n_1, n_1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1})f_{n_1, n_1+1} \quad (2.80)$$

para  $n_2 = n_1 + 1$  e

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_1+2} = f_{n_1+1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+3} + f_{n_1-1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2})f_{n_1, n_1+2} \quad (2.81)$$

para  $n_2 = n_1 + 2$ . Comparando as três últimas equações, podemos escrever

$$\mathcal{E}f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + U\delta_{n_1, n_2})f_{n_1, n_2} \quad (2.82)$$

sendo esta última a equação de recorrência na abordagem (A2).

Ao considerarmos, por exemplo, uma cadeia com 3 sítios, obtemos um espaço de Hilbert expandido em  $3^2 = 9$ . Com auxílio da equação (2.82), escrevemos o Hamiltoniano

na sua forma matricial como:

$$H = \begin{pmatrix} 2\epsilon_1 + U & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \epsilon_2 + \epsilon_1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_2 + U & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_2 + \epsilon_3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_3 + \epsilon_2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_3 + U \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

Para conhecermos mais sobre a natureza dos auto-estados do Hamiltoniano é necessária a diagonalização do mesmo, ou seja, resolver a equação secular

$$\det(H - \lambda I) = 0 \quad (2.84)$$

Esta pode ser feita através de rotinas numéricas apropriadas, como já citamos para A1.

## 2.3 Presença do Campo Elétrico

O caráter dinâmico de um elétron sob influência de campos elétricos e magnéticos em cristais tem sido muito estudado nos últimos anos [33, 34, 35, 37, 61]. Sob a influência de um campo elétrico constante e paralelo à cadeia, a função de onda eletrônica apresenta o que conhecemos da literatura como *oscilações de Bloch* [36, 58, 59]. Usaremos a seguir o modelo semiclássico para explicar tal fenômeno.

O modelo semiclássico consiste de obter as equações de movimento para a posição  $\mathbf{r}$  e o momento  $\mathbf{p}$  de cada elétron na presença de um campo externo através do formalismo clássico de Hamilton e depois “quantizar” o momento do elétron. A função Hamiltoniana Clássica  $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  pode então ser “quantizada” [62, 63] através da substituição  $\mathbf{p} \rightarrow \hbar\mathbf{k}$ . Logo, pelas equações de Hamilton temos

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \quad (2.85)$$

A primeira delas deve ser uma equação para a velocidade:

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial (\epsilon(\mathbf{p}/\hbar) + V(\mathbf{r}))}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p}/\hbar)}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}\end{aligned}\quad (2.86)$$

A equação anterior mostra a velocidade de um pacote de onda, também conhecida como velocidade de transmissão de energia no meio ou velocidade de grupo. A segunda equação pode ser escrita como:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (2.87)$$

Porém, se  $V(\mathbf{r})$  é a energia potencial de um elétron num campo fixo eletrostático, o lado direito da equação (2.87) é simplesmente a força clássica agindo sobre o elétron. Por exemplo, no campo elétrico  $\mathbf{E}$  nós temos:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\mathbf{E} \quad (2.88)$$

A equação (2.88) é imediatamente reduzida à:

$$\mathbf{k}(t) = \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar}t + \mathbf{k}_0 \quad (2.89)$$

Uma importante diferença entre a dinâmica de um elétron numa rede cristalina e um elétron livre é o fato que o espaço  $\mathbf{k}$  é agora dividido em zonas de Brillouin e dentro destas zonas existe uma dependência da energia em relação ao vetor de onda, ou seja,  $E_n(\mathbf{k})$ . Para entendermos a dinâmica de um elétron numa banda sob influência de um campo elétrico, observemos a figura 2.1. A banda tem o ponto de mínimo para  $\mathbf{k} = 0$  (ponto A). Considere que antes do campo elétrico seja aplicado, o elétron no estado  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 = 0$  tenha velocidade  $\mathbf{v} = (1/\hbar)\partial\epsilon/\partial\mathbf{k} = 0$ . Quando um campo elétrico for aplicado na direção negativa do eixo x, devido ao valor da carga (-e), o vetor  $\mathbf{k}$  do elétron percorre os estados até chegar ao ponto B, assim como descrito em (2.89). O ponto B é idêntico ao ponto B', entretanto são separados por um vetor da rede recíproca. Se considerarmos o esquema de

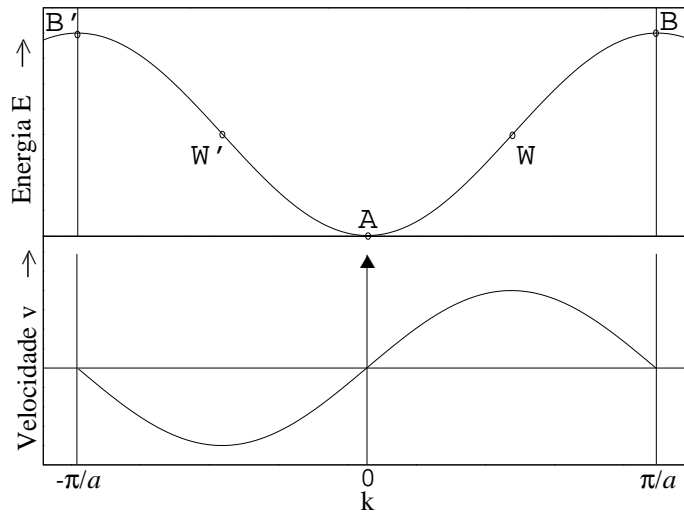


Figura 2.1: Dinâmica de um elétron numa banda. a) Uma banda cujo ponto de mínimo é A, pontos de inflexão W e W' e máximo para B e B'. b) Velocidade do elétron em função de  $\mathbf{k}$ .

zona repetida, ao alcançar o ponto B, o vetor de onda eletrônico sai da zona de Brillouin e entra na próxima zona. Se considerarmos o esquema de zona reduzida, tendo em vista a periodicidade da função  $E(\mathbf{k})$ , nós podemos descrever a mudança do vetor  $\mathbf{k}$  com o tempo como um processo periódico no qual o ponto  $\mathbf{k}$  vai de B' até A e de A até B, reaparecendo em B' e repetindo o ciclo novamente. A energia do elétron então oscila entre  $E(B')$  e  $E(A)$  e novamente  $E(B)=E(B')$ . Associada a este fenômeno, existe uma oscilação no espaço real, já que a velocidade (2.86) está periodicamente mudando de sinal. O período das oscilações é facilmente encontrado. Por simplicidade, admitamos que o vetor de onda  $\mathbf{k}$  esteja inicialmente em B', ou seja

$$\mathbf{k}(0) = \mathbf{k}_0 = -\frac{\pi}{a} \quad (2.90)$$

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

$$\mathbf{k}(t_{ocil.}) = \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar}t_{ocil.} + \mathbf{k}_0 \quad (2.91)$$



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

$$\begin{aligned} \mathbf{k}(t_{ocil.}) - \mathbf{k}(0) &= \frac{2\pi}{a} = \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar} t_{ocil.} \\ t_{ocil.} &= \tau = \frac{2\pi\hbar}{(-e)Ea} \end{aligned} \quad (2.92)$$

Desta última obtemos a frequência de oscilação

$$\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \frac{(-e)Ea}{\hbar} \quad (2.93)$$

Podemos encontrar também a largura do segmento no qual se dá oscilação do elétron. Para isso tomemos na equação (2.86), ou seja

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad (2.94)$$

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

$$\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_0 = \delta\mathbf{r} = \frac{1}{\hbar} \frac{\delta \epsilon(\mathbf{k})}{\delta \mathbf{k}} t \quad (2.95)$$

Observemos que  $t$  é o tempo necessário para uma oscilação e que  $\delta\mathbf{k}$  é a largura da primeira zona de Brillouin, ou seja,  $\delta\mathbf{k} = 2\pi/a$ . Assim, utilizamos a equação (2.92) para obtermos a largura de oscilação dada por:

$$\delta\mathbf{r} = \frac{1}{\hbar} \frac{a\delta\epsilon(\mathbf{k})}{2\pi} \frac{2\pi\hbar}{(-e)Ea} = \frac{\delta\epsilon(\mathbf{k})}{(-e)E} \quad (2.96)$$

Experimentalmente, as oscilações de Bloch tem sido observadas em super-redes semicondutoras através de experimentos óticos [33, 37]. Dunlap e Kenkre [61] apresentaram um estudo teórico sobre a dinâmica de uma partícula carregada numa cadeia linear de  $m$  sítios, na presença um campo elétrico dependente do tempo, orientado na direção da rede e na direção do termo de hopping. Um dos resultados encontrados é o indicativo de que uma partícula localizada pode ser delocalizada quando a dependência temporal do campo elétrico é senoidal. Um fato relevante em seu trabalho é a consideração dos elementos fora

da diagonal do operador posição  $x$  sendo desprezíveis, ou seja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \langle m|x \rangle \langle x|(eEx)|x \rangle \langle x|n \rangle = eEam\delta_{m,n} \quad (2.97)$$

sendo  $|m\rangle$  um estado de Wannier localizado sobre o sítio de rede  $m$ . Uma investigação teórica das oscilações de Bloch em sistemas  $1d$  foi feita em [34]. Os autores consideraram um pacote de onda Gaussiano num sistema *tight-binding* com desordem diagonal de longo alcance e observaram que este tipo de desordem não destrói a coerência das oscilações de Bloch. Foi observado que a largura do segmento sobre o qual o elétron oscila e a frequência de oscilação concordam com a teoria semiclássica apresentada anteriormente. Os mesmos autores encontraram evidências de oscilações de Bloch também em cadeias aperiódicas[35]. Em ambos os trabalhos, a equação de Schrödinger dependente do tempo foi resolvida numericamente.

Interessados em investigar o comportamento de dois elétrons sob influência de um campo elétrico uniforme e constante, adicionamos ao nosso Hamiltoniano (2.10) um termo que representa a influência de um campo elétrico constante e uniforme sobre as partículas por toda a cadeia. Assim, temos o Hamiltoniano

$$H = J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( c_{n+1,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} \right) + \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + \sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n,\uparrow}^{\dagger} c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^{\dagger} c_{n,\downarrow} \quad (2.98)$$

sendo  $F$  o campo elétrico externo,  $e$  é a carga da partícula e  $\mathbf{n}$  é o operador posição da partícula. Para que possamos estudar o comportamento dinâmico dos dois elétrons sob efeito do campo, resolveremos a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \quad (2.99)$$

Faremos isso a seguir para os casos (A1) e (A2).

- **Abordagem I(A1)**

A equação de Schrödinger dependente do tempo neste caso é:

$$H|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \quad (2.100)$$

A seguir desenvolveremos cada termo.

$$\begin{aligned}
H|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( c_{n+1, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma} + c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n+1, \sigma} \right)}_{H_7} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma}}_{H_8} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow}}_{H_9} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s
\end{aligned} \tag{2.101}$$

Tendo em vista que a única diferença entre os Hamiltonianos (2.10) e (2.98) é o termo correspondente à influência do campo elétrico, ou seja, os termos  $H_1$  e  $H_3$  do Hamiltoniano (2.10) são iguais, respectivamente, aos termos  $H_7$  e  $H_9$  do Hamiltoniano (2.98). Assim, faremos os cálculos a seguir somente para  $H_8$ . Para  $n_1 = n_2$ :

$$H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} \right) |\psi(n_1, n_2)\rangle_s \tag{2.102}$$

$$\begin{aligned}
H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_2} + eFn_1 \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle
\end{aligned} \tag{2.103}$$

$$H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} 2 \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \right) |\psi(n_1, n_1)\rangle \tag{2.104}$$

De posse das equações (2.19), (2.104) e (2.24), reescrevemos a equação de Schrö-

dingir dependente do tempo para elétrons dispostos em sítios iguais como:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( \sqrt{2} |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle + \sqrt{2} |\psi(n_1 - 1, n_1)\rangle \right) + \left( 2 \bar{\epsilon}_{n_1} + 2eFn_1 + \bar{U} \right) |\psi(n_1, n_1)\rangle \right] \quad (2.105)$$

Ao considerarmos que  $n_2 = n_1 + 1$ , temos:

$$H_8 |\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \quad (2.106)$$

$$H_8 |\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) + \left( \bar{\epsilon}_{n_1+1} + eF(n_1 + 1) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right] \quad (2.107)$$

$$H_8 |\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+1} + eF(n_1 + 1) \right) |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \quad (2.108)$$

Com auxílio das equações (2.28)(2.108), escrevemos a equação de Schrödinger independente do tempo para  $n_2 = n_1 + 1$  como:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( \sqrt{2} |\psi(n_1 + 1, n_1 + 1)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle + \sqrt{2} |\psi(n_1, n_1)\rangle |\psi(n_1 - 1, n_1 + 1)\rangle \right) + \left( \epsilon_{n_1} + eFn_1 + \epsilon_{n_1+1} + eF(n_1 + 1) \right) |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \right] \quad (2.109)$$

Tomando agora que  $n_2 = n_1 + 2$

$$\begin{aligned}
H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \\
&\quad \times \left( c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
&= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\epsilon}_{n_1+2} + eF(n_1 + 2) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 2_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right] \quad (2.110)
\end{aligned}$$

$$H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+2} + eF(n_1 + 2) \right) |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \quad (2.111)$$

Utilizando as equações (2.33) e (2.111) para escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo para  $n_2 = n_1 + 2$ , obtemos

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1, n_1 + 2)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + |\psi(n_1 - 1, n_1 + 2)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 1)\rangle \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \epsilon_{n_1} + eFn_1 + \epsilon_{n_1+2} + eF(n_1 + 2) \right) |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \right] \quad (2.112)
\end{aligned}$$

Tomando agora que  $n_2 = n_1 + 3$ .

$$\begin{aligned}
H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n, \uparrow}^\dagger c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^\dagger c_{n, \downarrow} \right) \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \\
&= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\epsilon}_{n_1+3} + eF(n_1 + 3) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle + |n_1 + 3_\uparrow, n_{1\downarrow}\rangle \right) \right] \quad (2.113)
\end{aligned}$$

$$H_8|\psi(n_1, n_2)\rangle_s = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+3} + eF(n_1 + 3) \right) |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle \quad (2.114)$$

Com a finalidade de obtermos a equação de Schrödinger independente do tempo para  $n_2 = n_1 + 3$ , utilizamos as equações (2.39) e (2.114) para escrever:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(n_1, n_2)\rangle_s &= \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1, n_1 + 3)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 4)\rangle \right. \right. \\ &+ \left. \left. |\psi(n_1 - 1, n_1 + 3)\rangle + |\psi(n_1, n_1 + 2)\rangle \right) \right. \\ &+ \left. \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+3} + eF(n_1 + 3) \right) |\psi(n_1, n_1 + 3)\rangle \right] \quad (2.115) \end{aligned}$$

Considerando nas equações (2.105), (2.109), (2.112) e (2.115) somente os termos não nulos dos somatórios, e introduzindo as grandezas adimensionais

$$\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{J}, \quad U = \frac{\bar{U}}{J}, \quad e \quad \mathcal{F} = \frac{eF}{J} \quad (2.116)$$

reescrevemos as equações de Schrödinger como:

$$i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_1} = \sqrt{2} f_{n_1, n_1+1} + \sqrt{2} f_{n_1-1, n_1} + (2\epsilon_{n_1} + U + 2\mathcal{F}n_1) f_{n_1, n_1} \quad (2.117)$$

para  $n_1 = n_2$ ,

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_1+1} &= \sqrt{2} f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + \sqrt{2} f_{n_1, n_1} \\ &+ f_{n_1-1, n_1+1} + \left( \epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_1+1} + \mathcal{F}(n_1 + 1) \right) f_{n_1, n_1+1} \quad (2.118) \end{aligned}$$

para  $n_2 = n_1 + 1$ , e para  $n_2 > n_1 + 1$

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} &= f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} \\ &+ f_{n_1, n_2-1} + (\epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_2} + \mathcal{F}n_2) f_{n_1, n_2} \quad (2.119) \end{aligned}$$

- **Abordagem II(A2)**

Para uma melhor identificação e visualização dos modelos, renomearemos os termos

do Hamiltoniano (2.98), de forma a reescrever este como:

$$\begin{aligned}
H|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( c_{n+1, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma} + c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n+1, \sigma} \right)}_{H_{10}} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) c_{n, \sigma}^{\dagger} c_{n, \sigma}}_{H_{11}} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
&+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \bar{U} c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow}}_{H_{12}} |\Psi(n_1, n_2)\rangle
\end{aligned} \tag{2.120}$$

Assim como foi feito para A1, estudaremos os aspectos dinâmicos dos dois elétrons. Para isso é necessário que resolvamos a equação de Schrödinger dependente do tempo. Comparando os Hamiltonianos (2.10) e (2.98) e recorrendo aos cálculos já feitos para este modelo na seção 2.2.2, precisamos calcular somente os termos  $H_{11}$ . Considerando os dois elétrons no mesmo orbital atômico, ou seja,  $n_1 = n_2$ , temos:

$$H_{11}|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} \right) |\Psi(n_1, n_2)\rangle \tag{2.121}$$

$$\begin{aligned}
H_{11}|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n, \uparrow}^{\dagger} c_{n, \uparrow} + c_{n, \downarrow}^{\dagger} c_{n, \downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \right) |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle
\end{aligned} \tag{2.122}$$

$$H_{11}|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} 2 \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \tag{2.123}$$

De posse das equações (2.66), (2.123), (2.61), reescrevemos a equação de Schrödin-

ger dependente do tempo para elétrons dispostos em sítios iguais como:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) \right. \\
&\quad + \left. |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle \right) \\
&\quad + \left( 2 \bar{\epsilon}_{n_1} + 2eFn_1 + \bar{U} \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle \Big] \quad (2.124)
\end{aligned}$$

Considerando agora que  $n_2 = n_1 + 1$ :

$$\begin{aligned}
H_{11} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + 2eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+1} + 2eF(n_1 + 1) \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \quad (2.125)
\end{aligned}$$

Concluimos através das equações (2.71), (2.125) que a equação de Schrödinger para  $n_2 = n_1 + 1$  é:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \right) \right. \\
&\quad + \left. |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) \\
&\quad + \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+1} + eF(n_1 + 1) \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \Big] \quad (2.126)
\end{aligned}$$

Tomando agora que  $n_2 = n_1 + 2$ :

$$\begin{aligned}
H_{11} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \left( \bar{\epsilon}_n + eF\mathbf{n} \right) \left( c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \right) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow}\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 + \bar{\epsilon}_{n_1+2} + eF(n_1 + 2) \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \quad (2.127)
\end{aligned}$$



Sabendo que  $H_6$  não é válido para este caso e tendo em mãos as equações (2.75), (2.127), escrevemos a equação de Schrödinger para  $n_2 = n_1 + 2$  como:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} f_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \left[ J \left( |\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_{\downarrow})\rangle \right. \right. \\ &+ \left. \left. |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \right) \right. \\ &+ \left. \left( \bar{\epsilon}_{n_1} + eFn_1 \bar{\epsilon}_{n_1+1} + eF(n_1 + 2) \right) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_{\downarrow})\rangle \right] \end{aligned} \quad (2.128)$$

Considerando nas equações (2.124), (2.126) e (2.128) somente os termos não nulos dos somatórios e acrescentando também as grandezas adimensionais

$$\epsilon_n = \frac{\bar{\epsilon}_n}{J}, \quad U = \frac{\bar{U}}{J} \quad e \quad \mathcal{F} = \frac{eF}{J} \quad (2.129)$$

reescrevemos a equação de Schrödinger dependente do tempo em função das amplitudes de probabilidade como:

$$i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_1} = f_{n_1+1, n_1} + f_{n_1, n_1+1} + f_{n_1-1, n_1} + f_{n_1, n_1-1} + (2\epsilon_{n_1} + 2\mathcal{F}n_1 + U) f_{n_1, n_1} \quad (2.130)$$

para  $n_1 = n_2$

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_1+1} &= f_{n_1+1, n_1+1} + f_{n_1, n_1+2} + f_{n_1-1, n_1+1} + f_{n_1, n_1} \\ &+ \left( \epsilon_{n_1} + eFn_1 + \epsilon_{n_1+1} + \mathcal{F}(n_1 + 1) \right) f_{n_1, n_1+1} \end{aligned} \quad (2.131)$$

para  $n_2 = n_1 + 1$  e

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_1+2} &= f_{n_1+1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+3} + f_{n_1-1, n_1+2} + f_{n_1, n_1+1} \\ &+ \left( \epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_1+2} + \mathcal{F}(n_1 + 2) \right) f_{n_1, n_1+2} \end{aligned} \quad (2.132)$$

para  $n_2 = n_1 + 2$ . Comparando as três últimas equações, podemos escrever

$$i \frac{d}{dt} f_{n_1, n_2} = f_{n_1+1, n_2} + f_{n_1, n_2+1} + f_{n_1-1, n_2} + f_{n_1, n_2-1} + \left( \epsilon_{n_1} + \mathcal{F}n_1 + \epsilon_{n_2} + \mathcal{F}n_2 + U\delta_{n_1, n_2} \right) f_{n_1, n_2} \quad (2.133)$$

De posse das equações (2.117), (2.118), (2.119) para a abordagem A1 e da equação (2.133) para a abordagem A2, podemos obter informações sobre a evolução temporal dos pacotes de onda eletrônicos. De forma a melhorar a estabilidade do algoritmo numérico, nós consideramos o potencial elétrico sendo nulo no sítio inicial, substituindo  $\mathcal{F}n_{1,2}$  por  $\mathcal{F}(n_{1,2} - n_{1,2}^0)$  nas equações de recorrência (2.117), (2.118), (2.119) e (2.133). Isto produzirá somente um deslocamento na origem de energia, sem nenhum efeito físico.

Na resolução das equações diferenciais anteriormente citadas se faz necessário o emprego de técnicas numéricas. Para os resultados apresentados no próximo capítulo, utilizamos um método baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal  $V(\Delta t)$ :

$$V(\Delta t) = \exp(iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(iH\Delta t)^l}{l!} \quad (2.134)$$

onde  $H$  é o Hamiltoniano. A nossa função de onda para um tempo  $t$  qualquer é dada por:

$$|\Psi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Psi(t=0)\rangle \quad (2.135)$$

Este método nos permite expandir o operador evolução temporal até altas ordens. No nosso caso específico, para os resultados apresentados a seguir, truncamos a expansão para  $n_0 = 21$ . Este método pode ser utilizado recursivamente de modo a obtermos a função de onda para um tempo  $t$ . Assim, para observarmos o pacote de onda num tempo final igual aos tempos apresentados no próximo capítulo, utilizamos um incremento de tempo  $\Delta t = 0.05$ . Os valores para a ordem de truncamento ( $n_0 = 21$ ) 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.

# Capítulo 3

## Oscilações de Bloch para dois elétrons interagentes

### 3.1 Introdução

No capítulo anterior vimos a influência do campo elétrico sobre um elétron movendo-se em um sistema com  $N$  átomos. Utilizando um formalismo semiclássico mostramos que a partícula fica confinada numa região do espaço recíproco, chamada de primeira zona de Brillouin. No espaço real a partícula apresenta um movimento oscilatório com frequência dependente do campo externo aplicado. Apresentaremos a seguir nossos resultados numéricos sobre influência de um campo elétrico em um sistema com dois elétrons interagentes. Motivados pela semelhança do comportamento do pacote de onda eletrônico entre cristais e sistemas aperiódicos, apresentaremos nossos resultados não somente para cadeias cristalinas, mas também cadeias aperiódicas. Nossos resultados sugerem a existência de um tipo peculiar de oscilações de Bloch para estas partículas interagentes. Além disso, observaremos que existem particularidades no comportamento dos pacotes de onda eletrônicos que dependem das condições iniciais: posição de cada elétron bem como o grau de interação entre os mesmos. Como foi dito anteriormente, a existência de duas abordagens relacionadas ao estudo de dois elétrons interagentes na literatura, nos levou a estudar o fenômeno das oscilações de Bloch em ambas as abordagens. Veremos a seguir a existência de semelhanças no comportamento dos pacotes de onda eletrônico nas abordagens (A1) e (A2).

## 3.2 Dois elétrons em cadeias cristalinas

### 3.2.1 Abordagem (A1)

No capítulo II (seções 2.2.1 e 2.3) foram apresentadas as relações de recorrência para esta abordagem referentes aos casos estático e dinâmico. Cada uma será utilizada para descrever o sistema em estudo e para obter grandezas que especifiquem características do mesmo. A caracterização dos potenciais iônicos da cadeia é dada pelo termo  $\epsilon_n$  nas equações de recorrência. Em nosso primeiro estudo, para que tenhamos o efeito da cristalinidade no modelo, assumiremos sem nenhuma perda de generalidade, que os potenciais iônicos serão  $\epsilon_n = 0$ . Dessa maneira as energias  $\epsilon_n$  serão vistas como referência de energia.

A partir das relações de recorrência, vários métodos podem ser empregados, de forma a obter diversas quantidades que caracterizam o modelo. Para o caso estacionário, utilizamos o método de diagonalização direta apresentada na seção 2.2.1. Através deste método, o Hamiltoniano descrito pelas equações (2.44),(2.45) e (2.48) é resolvido computacionalmente e as amplitudes de probabilidade são obtidas de forma numericamente exata através de um método de diagonalização de matrizes.

### Densidade de Estados (*DOS*)

A densidade de estados é definida como o número de níveis de energia dentro de um intervalo  $E + dE$ , sendo matematicamente expressa como:

$$DOS(E) = \sum_j \delta(E - E_j) \quad (3.1)$$

$E_j$  são os auto-valores obtidos da diagonalização do Hamiltoniano matriz. O número de níveis de energia contido dentro de um intervalo de energia pode ser usado de forma a construir um histograma para a  $DOS(E)$ . Na figura 3.1 podemos observar a densidade de estados normalizada em função da energia, para diversos valores de energia de interação de Hubbard.

Na ausência de interação entre os elétrons ( $U = 0$ ), observamos a densidade de estados sendo igual à obtida do Hamiltoniano de Anderson *tight-binding* 2d para um elétron numa rede quadrada. Esta equivalência concorda com o trabalho apresentado por Claro, Weitsz e Curilef[31]. Neste último, os autores propõem uma equivalência entre modelos para  $N$  elétrons interagentes numa cadeia e modelos de um único elétron em  $N$

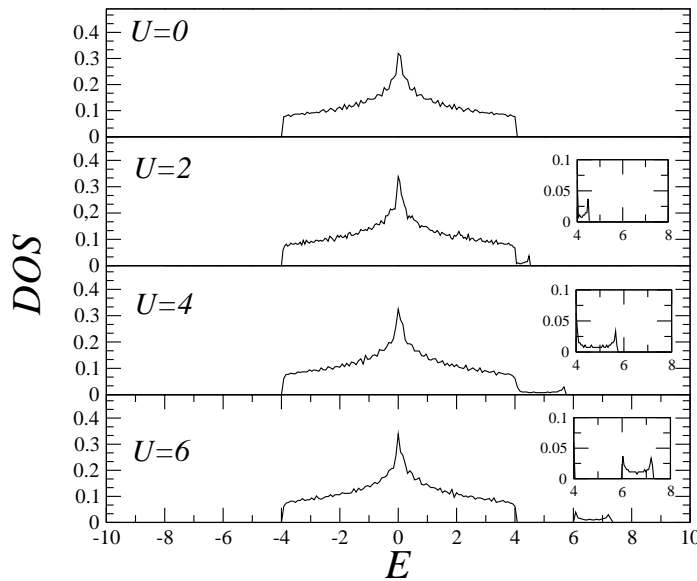


Figura 3.1: Densidade de estados obtida de uma cadeia com  $N = 100$  sítios. Para  $U = 0$  a densidade de estados é exatamente a mesma obtida do Hamiltoniano de Anderson *tight-binding*  $2d$  para um elétron. Para  $U > 0$  observamos o surgimento de uma sub-banda de estados ligados.

dimensões, tendo as interfaces dos planos dimensionais representando a interação. Logo, nosso modelo de dois elétrons interagentes (via interação de Hubbard) é equivalente a um sistema de uma única partícula movendo numa rede quadrada. A interação, assim como um potencial de interface, atua sobre a diagonal do plano, onde  $x = y$ . Na figura 3.1, percebe-se também o surgimento de uma sub-banda para  $U > 0$ . Quando  $U = 2$ , existe uma superposição da sub-banda de estados ligados com a banda de estados não-ligados, o que torna a observação mais complicada. De fato, observamos somente uma parte final da sub-banda em  $E \approx 4$ . Entretanto, para  $U = 4$ , a presença de uma sub-banda fica mais evidente. Quando  $U = 6$ , podemos ver a sub-banda totalmente separada da banda de estados não-ligados. Claro *et al* [31] mostraram através de resultados analíticos, que os limites da banda de estados ligados são dados por  $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ , sendo  $J$  a amplitude de hopping. Além disso, os autores mostram que somente para  $U > 4J$ , as duas bandas são completamente separadas. Tomando como exemplo  $U = 6$ , deveríamos ter o

surgimento de uma nova banda de estados ligados cobrindo o intervalo dado a seguir por:

$$\begin{aligned}
 U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2} &= 6 \leq E \leq \sqrt{6^2 + 16} \\
 &= 6 \leq E \leq \sqrt{52} \\
 &\cong 6 \leq E \leq 7.21
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Vemos que o resultado encontrado na equação (3.2) concorda com a densidade de estados apresentada figura 3.1. Para os casos em que  $U \leq 4J$ , constatamos também a superposição entre as bandas de estados estendidos e a banda de estados ligados, além da validade da expressão  $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$  na determinação da largura da sub-banda. Portanto nosso formalismo numérico reproduziu com boa precisão os resultados existentes na literatura [31].

### Distância Média ( $d(E_j)$ )

A existência da sub-banda de estados ligados apresentada anteriormente pode ser comprovada através da distância média entre os dois elétrons. Utilizaremos a expressão:

$$d(E_j) = \sum_{n_1}^N \sum_{n_2=n_1}^N |n_1 - n_2| |f_{n_1, n_2}|^2 \tag{3.3}$$

para encontrarmos evidências da existência de estados ligados e não-ligados. Estados ligados são estados energéticos com  $d(E_j) \approx 0$ .

A figura 3.2 mostra a distância média  $d(E_j)$  entre os dois elétrons para alguns valores de interação elétron-elétron. Para  $U > 0$  vemos que os auto-estados contidos na sub-banda de estados ligados apresentam pequenas distâncias. Podemos constatar para  $U = 2$  a superposição entre estados não interagentes, possuindo uma distância  $d(E_j)$  relativamente grande, e estados ligados, com uma distância  $d(E_j)$  muito pequena. Os resultados apresentados na figura 3.2 reforçam o indício da existência de estados ligados contidos numa sub-banda de energia com limites  $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ .

A seguir veremos o comportamento dinâmico dos dois elétrons quando na presença de um campo elétrico externo constante e uniforme. A existência de estados ligados e estendidos pode apresentar características determinantes no comportamento dinâmico de dois elétrons.

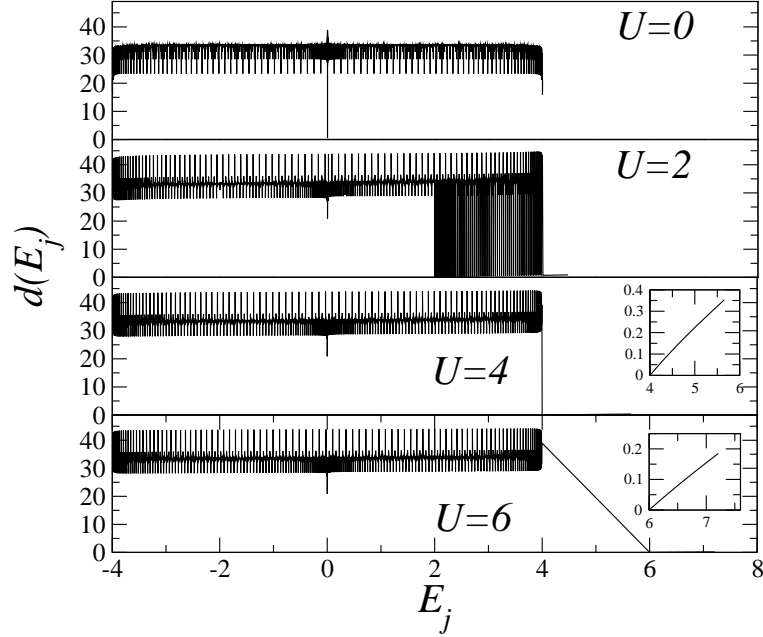


Figura 3.2: Distância Média  $d(E_j)$  entre dois elétrons obtida de uma cadeia com  $N = 100$  sítios. Para  $U > 0$  os auto-estados contidos na sub-banda apresentam pequenas distâncias  $d(E_j)$ , refletindo a natureza ligada destes estados.

### Posição Média ( $\langle n_i(t) \rangle$ )

Tendo como base a metodologia empregada nas referências [34, 35], utilizaremos a posição média

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} (n_i - n_i^0) |f_{n_1, n_2}(t)|^2 \quad i = 1, 2 \quad (3.4)$$

para caracterizar o comportamento dinâmico dos pacotes de onda eletrônicos. Nesta abordagem a função de onda para tempo nulo, ou seja, a condição inicial, será dada por:

$$|\Phi(t=0)\rangle = |\phi_{n_1^0, n_2^0}\rangle \quad (3.5)$$

onde cada elétron é colocado a uma distância  $d_0$  do centro da cadeia ( $n_1^0 - n_2^0 = 2d_0$ ). Desta forma teremos os elétrons dispostos inicialmente equidistantes do centro da cadeia.

A figura 3.3 apresenta a posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  para dois elétrons numa cadeia de

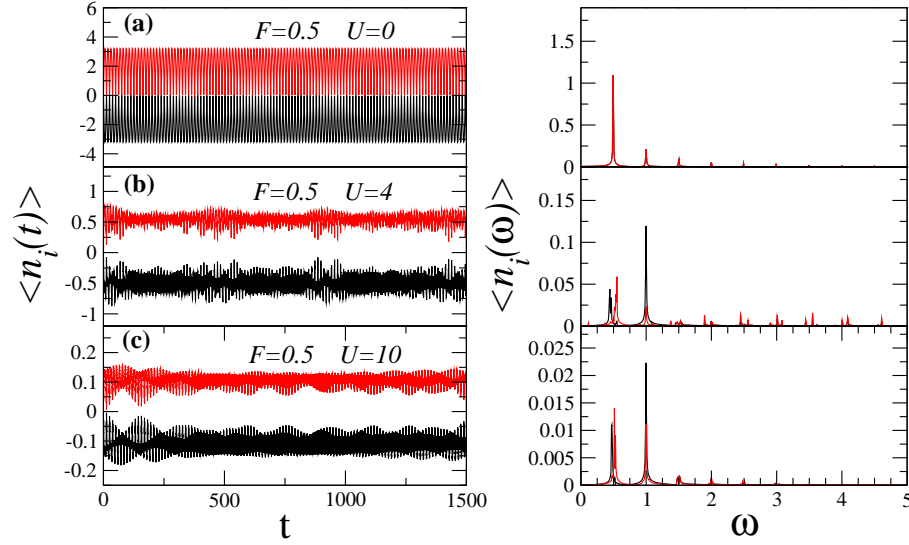


Figura 3.3: Lado esquerdo: Posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  de dois elétrons numa cadeia de  $N = 120$  sítios, com  $d_0 = 0$  e na presença de um campo  $F = 0.5$ . (a)  $U = 0$ ; (b)  $U = 4$ ; (c)  $U = 10$ . Lado direito: A transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  mostra um comportamento oscilatório com a frequência predominante de  $\omega = 2F$  para  $U > 0$ .

$N = 120$  sítios, dispostos inicialmente no mesmo sítio ( $d_0 = 0$ ), sujeitos a um campo elétrico externo de  $F = 0.5$  e interação elétron-elétron com valores (a)  $U = 0$ ; (b)  $U = 4$ ; (c)  $U = 10$ . A posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  mostra que há uma tendência dos elétrons afastarem-se inicialmente, mantendo um movimento oscilatório evitando a dupla ocupação. Quando  $U = 0$ , a amplitude das oscilações é grande, de maneira que os elétrons alcancem sítios vizinhos, retornando ao sítio inicial devido a presença do campo elétrico. Através da transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  podemos observar que neste caso os elétrons apresentam um comportamento oscilatório com frequência predominante de  $\omega = F$ . Isto se deve à ausência de interação ( $U = 0$ ), que permite que os elétrons se comportem como independentes. Quando  $U = 4$ , a sua posição média apresenta um comportamento oscilatório dos elétrons afastados das suas posições iniciais, caracterizando a existência de repulsão. A existência de estados ligados apresentada anteriormente, provoca um movimento oscilatório quase coerente. Isto pode ser visto no espectro da transformada de Fourier, que mostra um comportamento oscilatório com a frequência predominante de  $\omega = 2F$ . Vemos em (c) que para fortes valores de interação,  $U = 10$ , os elétrons também oscilam afastados das suas posições iniciais, só que numa escala menor de distância. A frequência predominante  $\omega = 2F$



é entendida como proveniente da existência de estados ligados. Para (b) e (c) observa-se a existência de frequências de oscilação  $\omega = F$ , de amplitudes menores, provenientes do movimento oscilatório dos elétrons não ser totalmente coerente. Estes resultados mostram a relevância dos estados ligados no comportamento oscilatório dos elétrons. A existência de interação  $U > 0$  provoca o movimento coerente entre os elétrons, se comportando como uma só partícula. Esta afirmativa associada aos argumentos semi-clássicos da equação (2.88), sugerem que os elétrons se comportam como uma única partícula de carga igual à  $-2e$ . Esta afirmação com relação a frequência das oscilações na presença de interação Coulombiana será melhor investigada a posteriori.

A análise da transformada de Fourier mostra oscilações de menor amplitude quanto maior a interação elétron-elétron. Através de argumentos semi-clássicos apresentados na seção 2.3, vemos que as amplitudes de oscilação são proporcionais a largura da banda. Para  $U > 0$ , observamos a existência de uma banda de estados ligados, tendo uma largura definida pela equação  $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$  [31]. Esta última mostra uma correspondência entre o grau de interação e a largura da banda. Quanto maior o grau de interação, menor a largura da banda de estados ligados, justificando o fato das amplitudes de oscilação serem menores quanto maiores forem os valores da interação.

### 3.2.2 Abordagem (A2)

No capítulo anterior, seção (2.2.2), apresentamos a relação de recorrência para a construção do Hamiltoniano matriz desta abordagem. Assim como no modelo anterior, assumimos  $\epsilon_n = 0$  nas relações de recorrência 2.82 e 2.133, fazendo com que nossa cadeia se torne cristalina. Aplicamos o método de diagonalização direta utilizando rotinas numéricas da biblioteca LAPACK de álgebra linear, assim como foi feito para o modelo anterior. Com os resultados obtidos da diagonalização, apresentamos a seguir a densidade de estados (*DOS*).

#### Densidade de Estados (*DOS*)

Na figura 3.4 podemos observar a densidade de estados normalizada em função da energia para diversos valores da energia de interação de Hubbard. Primeiramente podemos observar a grande semelhança entre a densidade de estados obtida em (A1) e (A2). Esta semelhança concorda com o trabalho apresentado por Claro, Weitsz e Curilef [31]. Neste trabalho os autores mostram a equivalência entre o modelo de  $N$  elétrons interagentes

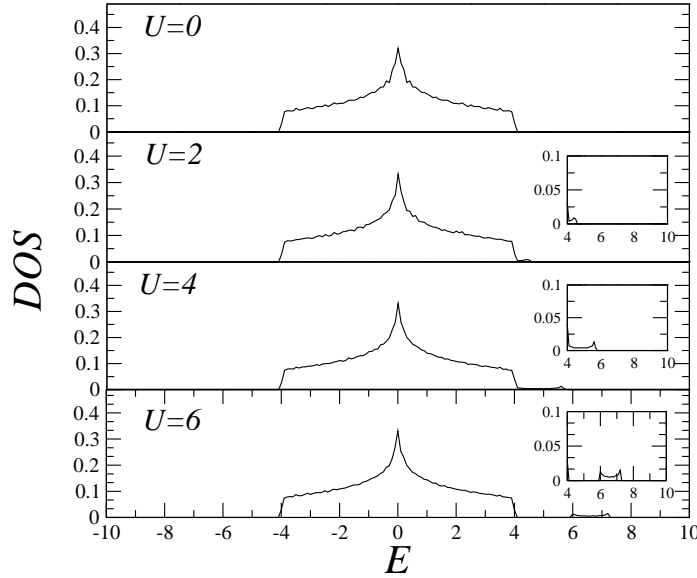


Figura 3.4: Densidade de estados normalizada  $DOS$  em função da energia para  $U = 0, 2, 4, 6$ . A cadeia utilizada possui  $N = 100$  sítios. Para  $U > 0$  observamos o surgimento de uma sub-banda de estados ligados.

numa cadeia e o modelo de um único elétron numa rede de  $N$  dimensões. Na ausência de interação entre os elétrons, a densidade de estados é a mesma obtida do Hamiltoniano de Anderson tight-binding  $2d$  para um elétron. Também observamos figura 3.4 o surgimento de uma sub-banda para  $U > 0$ . Assim como em (A1), os valores de largura desta sub-banda concordam com a referência [31], sendo incontestável que essa sub-banda é formada por estados ligados.

### Distância Média ( $d(E_j)$ )

A distância média  $d(E_j)$  foi utilizada mais uma vez para investigar a existência de estados ligados contidos numa sub-banda gerada pela interação elétron-elétron. Os resultados apresentados na figura 3.6 mostram, para  $U > 0$ , a existência de estados energéticos cuja distância é  $d(E_j) \approx 0$ . Podemos ver que a faixa de energia correspondente a essas pequenas distâncias são exatamente as mesmas encontradas na figura 3.4. Este comportamento é um forte indício de que os estados contidos dentro da sub-banda de energia são ligados.

Observamos para (A1) que o comportamento oscilatório dos elétrons está relacio-

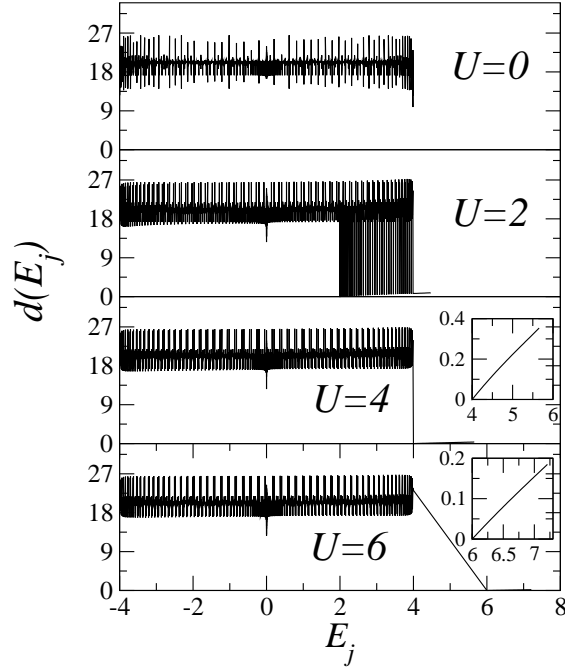


Figura 3.5: Distância Média  $d(E_j)$  entre dois elétrons obtida de uma cadeia com  $N = 100$  sítios. Para  $U > 0$  os auto-estados contidos na sub-banda apresentam pequenas distâncias  $d(E_j)$ , refletindo a natureza ligada destes estados

nado com o grau de interação entre os mesmos. A existência de estados ligados nos faz pensar que haverá oscilações nas quais a frequência predominante é  $\omega = 2F$ , assim como visto em (A1). A seguir apresentaremos resultados comprovando a existência deste comportamento também para esta abordagem. No entanto, os resultados a seguir apresentam um estudo mais detalhado, com o objetivo de entendermos melhor a influência da interação, campo elétrico e posição inicial, sobre a dinâmica dos pacotes de onda eletrônicos.

### Posição Média ( $\langle n_i(t) \rangle$ )

Como descrito no início da seção, fazemos  $\epsilon_n = 0$  na equação de recorrência 2.133. Desse modo, utilizando o método baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal descrito no final do capítulo anterior, obtemos a posição média de cada pacote de onda eletrônico. Para que possamos entender um pouco mais sobre o comportamento oscilatório de dois elétrons interagentes, consideramos inicialmente um pacote de onda

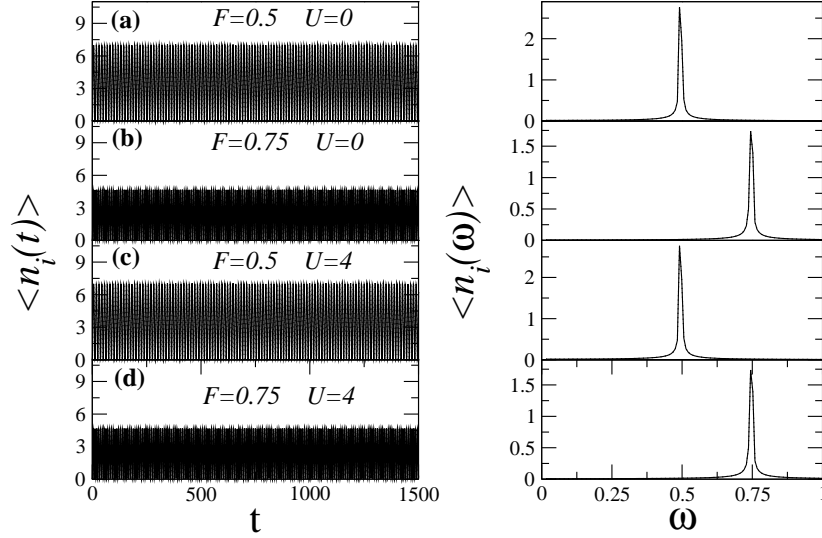


Figura 3.6: Lado esquerdo: Posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  de dois elétrons com  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 10$  numa cadeia de  $N = 120$  sítios. Em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.75$  e  $U = 0$ ; (c)  $F = 0.5$  e  $U = 4$ ; (d)  $F = 0.75$  e  $U = 4$ . Lado direito: A transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  mostra o comportamento oscilatório com frequência  $\omega = F$ .

eletrônico como uma função Gaussiana dada por:

$$\langle n_1 s_1, n_2 s_2 | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp \left[ -\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2} \right] \times \exp \left[ -\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2} \right] \quad (3.6)$$

onde  $A(\sigma)$  é uma constante de normalização e  $\sigma$  é a largura do pacote de onda. Isto nos possibilita analisar a influência da largura do pacote de onda sobre a dinâmica dos elétrons. Na investigação do comportamento da sua evolução temporal, consideraremos dois elétrons inicialmente dispostos nos orbitais  $N/2 - d_0$  e  $N/2 + d_0$ . Desta forma teremos os elétrons dispostos inicialmente equidistantes do centro da cadeia. Utilizando a condição inicial definida através da equação (3.6) podemos simular tanto a condição tipo “delta” (ou seja,  $\sigma = 0$ ), quanto uma gaussiana de largura  $\sigma$ . Na abordagem A2, do ponto de vista matemático e computacional, implementar este tipo de condição inicial é razoavelmente estável. Na abordagem A1, a utilização de condições iniciais distintas da função delta de Dirac é um pouco mais complexa. Esta é uma das vantagens da abordagem de elétrons distinguíveis sobre outros formalismos.

A figura 3.6 mostra os resultados da posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  (lado esquerdo) e sua

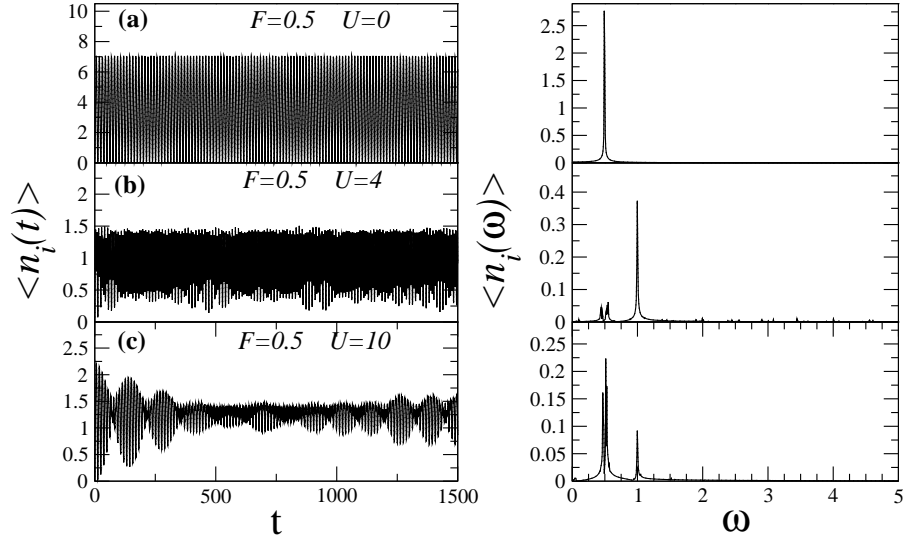


Figura 3.7: Lado esquerdo: Posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  de dois elétrons com  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 0$  numa cadeia de  $N = 120$  sítios. Em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.5$  e  $U = 4$  e (c)  $F = 0.5$  e  $U = 10$ . Lado direito: A transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  mostra o comportamento oscilatório com frequência predominante  $\omega = 2F$  quando  $U = 4$  e  $\omega = F$  para  $U = 0$  e  $U = 10$ .

transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  (lado direito) para dois elétrons com  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 10$  em uma cadeia de  $N = 120$  sítios. Em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.75$  e  $U = 0$ ; (c)  $F = 0.5$  e  $U = 4$ ; (d)  $F = 0.75$  e  $U = 4$ . Analizando o espectro da transformada de Fourier, observamos para todos os parâmetros de campo  $F$  e interação  $U$  um comportamento oscilatório de frequência  $\omega = F$ . Lembrando que os elétrons estão inicialmente distantes um do outro,  $d_0 \gg \sigma$ , vemos que os resultados concordam com a literatura [24, 25, 26], pois o movimento oscilatório coerente entre os elétrons se dá somente quando a distância entre os dois é próxima do comprimento de localização de uma partícula. Na ausência de estados ligados os elétrons se comportam como independentes, tendo um comportamento oscilatório previsto pelos argumentos semi-clássicos apresentados na seção 2.3. Podemos ver ainda que as amplitudes de oscilação variam com respeito ao campo elétrico externo, concordando com os argumentos semi-clássicos apresentados na seção 2.3, equação (2.96).

Na figura 3.7 mostramos os resultados da posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  (lado esquerdo) e sua transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  (lado direito) para dois elétrons com  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 0$  numa cadeia de  $N = 120$  sítios. Em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.5$  e  $U = 4$ ; (c)  $F = 0.5$  e  $U = 10$ .

Para  $U = 0$ , observamos um comportamento oscilatório com frequência  $\omega = F$ , devido ao fato dos elétrons se comportarem como independentes na ausência de interação. Para  $U = 4$ , vemos que a frequência de oscilação predominante é  $\omega = 2F$ , comportamento semelhante ao encontrado utilizando a abordagem A1. Atribuímos este fato à existência de estados ligados. No entanto, quando  $U = 10$ , temos uma frequência predominante de  $\omega = F$ , comportamento diferente do apresentado na abordagem anterior. Observamos também que a amplitude de oscilação diminui à medida que o grau de interação aumenta. Este resultado concorda com os argumentos semi-clássicos apresentados anteriormente e a literatura [31]. O surgimento de frequências  $\omega = 2F$  e  $\omega = F$  nas figuras 3.6b e 3.6c respectivamente, mostra um comportamento oscilatório dominado por estados ligados ou estados estendidos. Em 3.6b os estados ligados dominam o movimento dos elétrons, enquanto que em 3.6c o movimento é dominado pelos estados estendidos.

O comportamento oscilatório para  $U = 10$  diferente entre A1 e A2 nos levou a examinarmos a influência da interação elétron-elétron na observação do fenômeno de dupla frequência predominante. Para isto, investigamos a média temporal da probabilidade de dupla ocupação, dada pela equação

$$P_2 = \sum_{j=1}^N \langle |f_{j,j}|^2 \rangle \quad (3.7)$$

para uma escala de energia de interação  $U$ .

A figura 3.8 apresenta a influência da interação para pacotes de onda de diversas larguras ( $\sigma = 0, 1, 2, 3$ ), sujeitos à um campo elétrico externo de  $F = 0.5$ . Consideramos os pacotes de onda eletrônicos inicialmente num mesmo orbital iônico localizado no centro da cadeia. Quando  $\sigma = 0$ , o pacote de onda se torna uma função delta, assim como na abordagem apresentada anteriormente. A dupla ocupação inicial é igual à unidade, ou seja,  $P_2(t = 0) = 1$ . Vemos, mesmo na ausência de interação, uma probabilidade de dupla ocupação diferente de zero. Este fato é consequência do campo elétrico aplicado, fazendo com que os elétrons oscilem em torno da sua posição inicial. Quando  $U = 0$ , como foi mostrado anteriormente, os pacotes de onda difundem-se independentemente, embora retornem à sua posição inicial devido a presença do campo elétrico externo. Para valores de  $U > 0$ , o surgimento de estados ligados correlacionam o movimento dos dois elétrons. Recorrendo a figura 3.4, vemos que grandes valores de interação provocam a existência de uma sub-banda composta apenas por estados ligados. Isto torna o comportamento

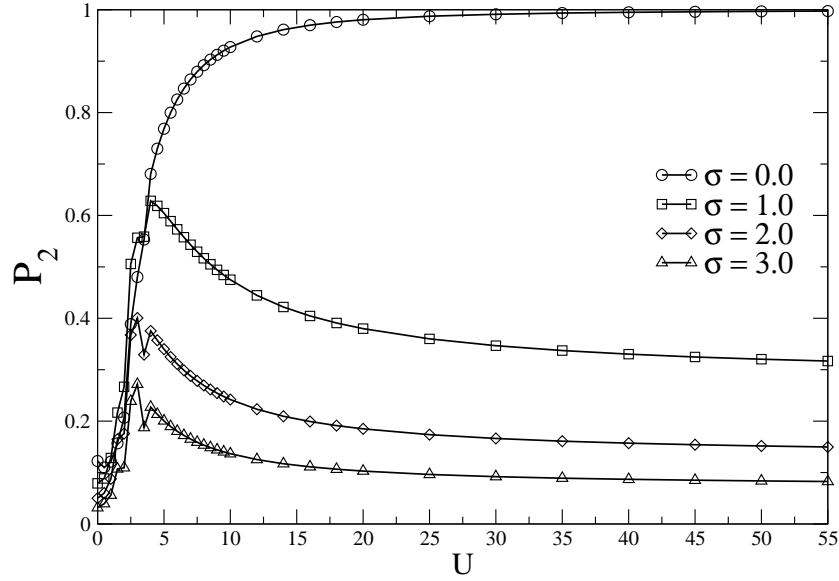


Figura 3.8: Probabilidade de dupla ocupação  $P_2 = \sum_{j=1}^N \langle |f_{j,j}|^2 \rangle$  em função da energia de interação  $U$  para  $\sigma = 0, 1, 2, 3$ . Para pacotes de onda de larguras finitas observa-se um valor de energia  $U$  onde a probabilidade de dupla ocupação é máxima.

dinâmico dos elétrons mais coerente à medida que a energia de interação  $U$  cresce. Deste modo, probabilidade de dupla ocupação permanecerá sendo igual à unidade quando os elétrons possuírem forte grau de interação.

Nos casos em que os pacotes de onda possuem uma largura finita,  $P_2(t=0) < 1$ . Os pacotes de onda eletrônicos comportam estados ligados, e estados estendidos. Enquanto a interação favorece a dinâmica coerente dos elétrons, seu caráter repulsivo aumenta a largura do pacote de onda. No entanto, o aumento da largura do pacote provoca a diminuição da probabilidade de dupla ocupação, já que estes são oriundos da superposição de estados ligados. Esta competição entre o movimento coerente e a repulsão entre os elétrons é observado na figura 3.8, onde vemos a probabilidade de dupla ocupação ser maior para valores próximos de  $U = 4$ . A energia de interação  $U$  correspondente ao máximo da probabilidade de dupla ocupação representa também a situação física de máxima coerência entre o hopping dos elétrons.

### 3.3 Dois elétrons em cadeias aperiódicas

Nas duas primeiras seções deste capítulo estudamos o comportamento de dois elétrons interagentes, sob influência de um campo elétrico externo, em cadeias cristalinas. A existência de alguns trabalhos relacionados à oscilações de Bloch em sistemas unidimensionais não periódicos motivou o estudo apresentado a seguir. Um destes trabalhos foi desenvolvido por Lyra *et al* [34] que encontraram evidências da existência de oscilações de Bloch em cadeias  $1d$  cujos potenciais possuem uma desordem correlacionada de longo alcance. Tivemos também como motivação o estudo de F.A.B.F. de Moura *et al* [35], onde apresentam resultados sobre o caráter dinâmico de um elétron, numa cadeia aperiódica, sob influência de um campo elétrico. Os autores observaram o fenômeno de oscilações de Bloch para alguns parâmetros de formação da aperiodicidade dos potenciais. Estes parâmetros,  $0 < \nu < 1$  e  $0 < V < 2$ , são referentes a uma faixa de estados estendidos próximos ao centro da banda[17](ver seção 1.4).

Os resultados a seguir correspondem ao estudo de dois elétrons de spins opostos numa cadeia quasi-cristalina sujeita a um campo elétrico externo constante e uniforme. Esperamos que a presença da interação elétron-elétron, associada à presença do campo elétrico e da aperiodicidade dos potenciais iônicos, mostrem novos aspectos para o comportamento dinâmico dos pacotes de onda eletrônicos. É importante salientar que todas as técnicas numéricas (diagonalização de matrizes e resolução da equações diferenciais) utilizadas nos estudos a seguir foram as mesmas empregadas no estudo de cadeias cristalinas.

#### 3.3.1 Abordagem (A1)

Para que tenhamos um modelo de uma cadeia aperiódica, consideraremos os potenciais dos sítios ( $\epsilon_n$ ), nas equações de recorrência (2.44)(2.45)(2.48) e (2.117)(2.118)(2.119), sendo regidas pela equação:

$$\epsilon_n = V \cos(2\pi\alpha n^\nu) \quad (3.8)$$

Para o caso de um único elétron, essa aperiodicidade representa um caráter importante na dinâmica dos pacotes de onda, relacionada principalmente à localização inicial dos pacotes de onda[35].



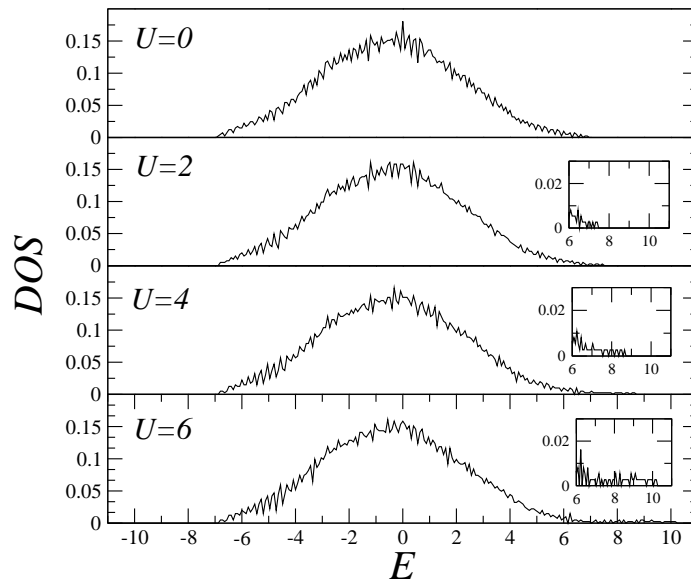


Figura 3.9: Densidade de estados obtida de uma cadeia de  $N = 100$  sítios para dois elétrons interagentes sujeitos ao potencial aperiódico, do tipo equação (3.8), com parâmetros  $V = 1.5$ ,  $2\pi\alpha = 1.0$  e  $\nu = 0.5$ . Para  $U > 0$  observamos a extensão da largura da banda, indicando a existência de estados ligados.

### Densidade de Estados (*DOS*)

Conforme foi dito anteriormente, a densidade de estados nos informa sobre a quantidade de níveis energéticos contidos num intervalo de energia  $E + dE$ . Na figura 3.9 temos a densidade de estados normalizada, em função da energia, para diversos valores de energia de interação de Hubbard. Inicialmente, comparando as figuras 3.9 e 3.1, observamos uma mudança na estrutura da densidade de estados. No caso cristalino, a DOS apresenta uma superfície achatada nas extremidades que são determinadas pela largura da banda de Bloch. A presença de desordem nos potenciais provoca o surgimento de estados localizados, elementos não presentes na estrutura cristalina. Podemos observar que para o modelo com aperiodicidade, a estrutura da densidade de estados é suave para valores de energia nas extremidades da banda. A largura da faixa de energias permitidas é influenciada agora pela amplitude do potencial  $V^1$ , assim como no modelo de Anderson. Na ausência de interação,  $U = 0$ , vemos que a banda de energia é formada por estados estendidos

<sup>1</sup>A amplitude do potencial utilizada em nosso modelo é  $V = 1.5$ .

- compreendidos no centro da banda; e estados localizados - presentes nos extremos da banda. Para  $U > 0$  nota-se o aumento da largura da banda para valores de energia maiores que zero. Este aumento de energia está diretamente relacionado à existência de estados ligados, assim como no caso cristalino mostrado anteriormente. Outro aspecto presente na figura 3.9 é o não surgimento de uma sub-banda de estados ligados isolada quando  $U = 6$ , como no caso cristalino. Na presença da desordem, a superposição dos níveis energéticos permitidos para cada átomo não ocorre de maneira coesa, como em estruturas cristalinas. A diferença entre os níveis energéticos para cada átomo enfraquece a formação de bandas e conseqüentemente, diminui a existência de energias proibidas. A baixa densidade de estados para estados ligados nos leva a pensar que estes terão menor influência na dinâmica dos pacotes de onda eletrônicos que para o caso cristalino. Para investigarmos tal influência apresentaremos a seguir resultados da posição média dos pacotes de onda eletrônicos.

### Posição Média ( $\langle n_i(t) \rangle$ )

Assim como na seção 3.2.1, apresentaremos resultados sobre o comportamento dinâmico de dois pacotes de onda eletrônicos representados por funções delta, de modo que tenham como condição inicial uma distância  $d_0$  do centro da cadeia. Desta forma teremos os elétrons dispostos inicialmente equidistantes do centro da cadeia. Os resultados a seguir são para uma cadeia aperiódica de  $N = 100$  sítios, com parâmetros  $V = 1.5$ ;  $2\pi\alpha = 1.0$ ;  $\nu = 0.5$  na presença de um campo elétrico  $F = 0.5$ .

Na figura 3.10 temos a posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  e a transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  para os valores de interação de Hubbard (a)  $U = 0$ ; (b)  $U = 4.5$  e (c)  $U = 10$ . Podemos observar uma grande semelhança entre o comportamento dos elétrons em cadeias cristalina e cadeias aperiódicas, quando estas últimas se encontram na zona de estados estendidos. A transformada de Fourier nos mostra que na ausência de interação os elétrons, há um comportamento oscilatório apresentando uma frequência predominante  $\omega \simeq F$ . Na presença de interação, a frequência predominante de oscilação dos elétrons é  $\omega \simeq 2F$ . Estes resultados mostram a influência dos estados ligados no movimento oscilatório dos elétrons. O hopping dos elétrons é feito de maneira coerente na existência de estados ligados, mesmo comportamento observado para as cadeias cristalinas (ver figura 3.3). Entretanto, nota-se uma pequena diferença na frequência de oscilação, fator não presente nos resultados apresentados para cadeias cristalinas. Este fato é conseqüência da força de campo local produzida pela aperiodicidade do potencial sobre o elétron inicialmente disposto num dado

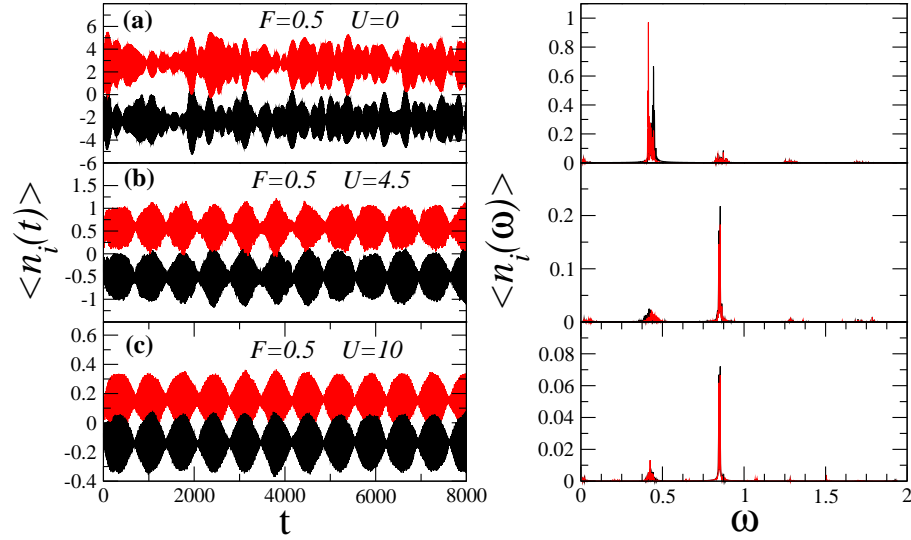


Figura 3.10: Lado esquerdo: Posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  de dois elétrons numa cadeia aperiódica do tipo equação (3.8), com parâmetros  $V = 1.5$ ,  $2\pi\alpha = 1.0$ ,  $\nu = 0.5$  e  $N = 100$  sítios. Os elétrons estão inicialmente em  $d_0 = 0$  e sob a influência de  $F = 0.5$ . (a)  $U = 0$ ; (b)  $U = 4.5$ ; (c)  $U = 10$ . Lado direito: A transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  mostra um comportamento oscilatório com frequência predominante de  $\omega \simeq 2F$  para  $U > 0$ .

sítio. O campo total para a posição  $n_0$  é dado por um campo efetivo  $F_{ef}$  dado por:

$$F_{ef} = \frac{d\epsilon_n}{dn} + F \quad (3.9)$$

A existência deste campo efetivo  $F_{ef}$  foi apresentada em [35]. Os autores mostraram a influência do campo efetivo, apresentando resultados para elétrons dispostos inicialmente em diversas posições da cadeia. Vejamos na figura 3.11a uma sequência aperiódica de potenciais, igual à equação (3.8), para uma cadeia de  $N = 100$  sítios e em 3.11b vemos sua derivada. Lembremos que os elétrons da figura 3.10 estão inicialmente no centro da cadeia, ou seja,  $n_{1,2}^0 = 50$ . Quando  $U = 0$ , os dois elétrons se comportam como independentes, tendo um campo efetivo igual à

$$F_{ef}^{1,2} = \frac{d\epsilon_n}{dn} + F = -0.08 + 0.5 = 0.42, \quad (3.10)$$

concordando com o resultado apresentado na figura 3.10.

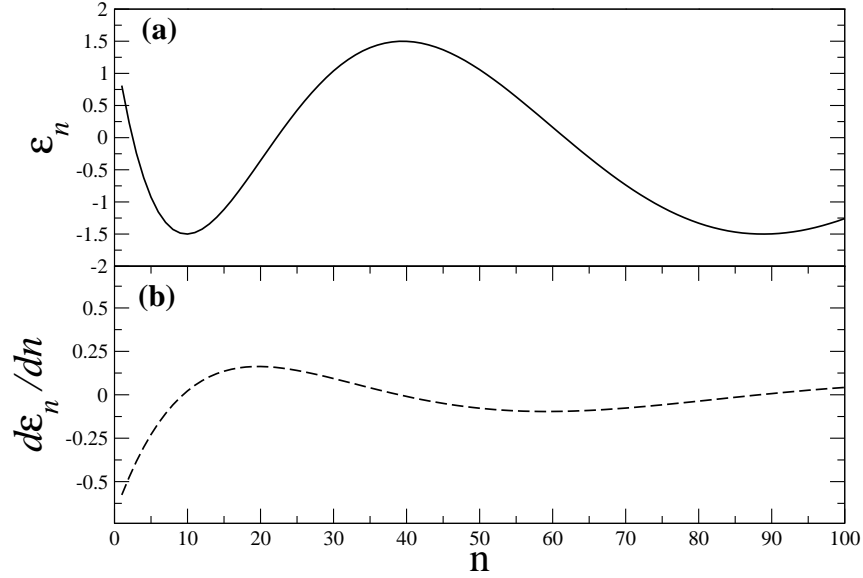


Figura 3.11: (a) Potencial aperiódico do tipo equação (3.8) calculado com parâmetros  $V = 1.5$ ,  $2\pi\alpha = 1.0$  e  $\nu = 0.5$  para uma cadeia de  $N = 100$  sítios. (b) A derivada do potencial mostra que quanto maior o índice do sítio, menor o seu máximo local.

Vimos para o caso cristalino, este concordando com a literatura [24, 25, 26], que a existência de estados ligados se dá somente quando a distância entre os dois é próxima do comprimento de localização de uma partícula. Quando os elétrons estão inicialmente no mesmo sítio, a existência de interação  $U > 0$  provoca um *hopping* coerente entre os elétrons, se comportando como uma só partícula. Da mesma forma que em 3.2.1, os elétrons se comportam como um a única partícula de carga igual  $-2e$ . O campo efetivo sobre os dois elétrons ligados então se torna:

$$F_{ef}^{lig} = -0.16 + 1.0 = 0.84 \quad (3.11)$$

concordando com os resultados apresentados na figura 3.10.

### 3.3.2 Abordagem (A2)

Para o caso cristalino, foi observado uma grande semelhança entre as abordagens A1 e A2. Com o objetivo de fundamentar mais ainda os resultados apresentados no estudo das duas abordagens, apresentaremos a seguir resultados para cadeias aperiódicas

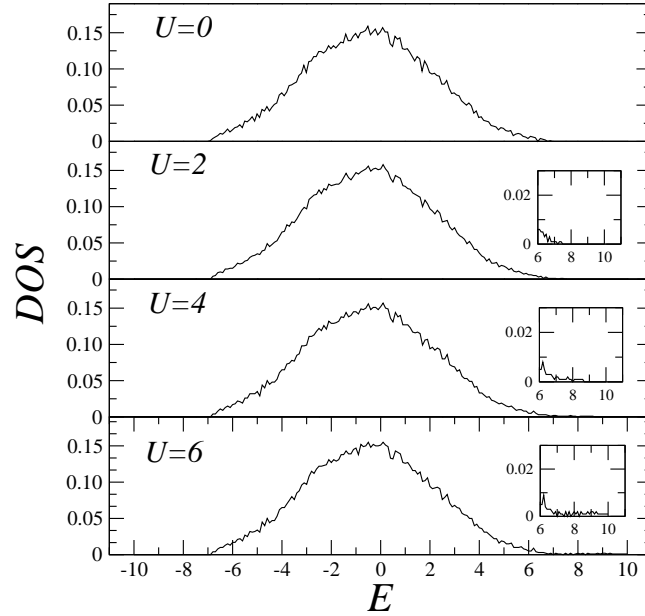


Figura 3.12: Densidade de estados obtida de uma cadeia de  $N = 100$  sítios para dois elétrons interagentes numa cadeia aperiódica com parâmetros  $V = 1.5$ ,  $2\pi\alpha = 1.0$  e  $\nu = 0.5$ . Para  $U > 0$  observa-se o surgimento de estados ligados.

utilizando a abordagem A2. Inicialmente, consideramos os potenciais dos sítios ( $\epsilon_n$ ), nas equações de recorrência 2.82 e 2.133, sendo regidos segundo a equação 3.8.

### Densidade de Estados ( $DOS$ )

Na figura 3.12 apresentamos a densidade de estados normalizada ( $DOS$ ) para alguns valores de interação de Hubbard,  $U = 0, 2, 4, 6$ . Podemos notar uma grande semelhança entre 3.12 e 3.9. Para estruturas cristalinas, observou-se uma equivalência entre o modelo de  $N$  elétrons interagentes numa estrutura unidimensional e o modelo de um único elétron em  $N$  dimensões [31]. Observando a grande semelhança entre as densidades de estados apresentadas pelas abordagens A1 e A2, propomos que haja uma equivalência entre o nosso modelo e um modelo de um único elétron numa rede quadrada aperiódica, com um potencial de interação presente na diagonal entre os planos  $x = y$ .

Na ausência de interação entre os elétrons ( $U = 0$ ), a largura da faixa de energias permitidas está relacionada à amplitude do potencial  $V = 1.5$ . Observa-se a existência de estados estendidos - compreendidos no centro da banda; e estados localizados -

compreendidos nas extremidades da banda. A presença de interação ( $U > 0$ ) provoca o aparecimento de estados ligados, com energia proporcional à energia de interação.

### Posição Média ( $\langle n_i(t) \rangle$ )

Dada a equação de recorrência 2.133, com os potenciais  $\epsilon_n$  dados pela equação 3.8, obtemos a posição média dos pacotes de onda eletrônicos. Assim como foi feito em 3.2.2, consideramos inicialmente que cada pacote de onda seja representado por uma função Gaussiana dada por

$$\langle n_1 s_1, n_2 s_2 | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp \left[ -\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2} \right] \times \exp \left[ -\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2} \right] \quad (3.12)$$

onde  $A(\sigma)$  é uma constante de normalização; investigando a sua evolução temporal. As posições iniciais dos pacotes de onda ( $n_1^0, n_2^0$ ) são escolhidas sendo ( $N/2 - d_0, N/2 + d_0$ ), para que os elétrons estejam dispostos equidistantes do centro da cadeia.

A figura 3.13 mostra resultados da posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  e da sua transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  para dois elétrons com  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 10$  numa cadeia aperiódica de  $N = 100$ , com parâmetros  $V = 1.5$ ,  $2\pi\alpha = 1.0$  e  $\nu = 0.5$ . Em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.75$  e  $U = 0$ ; (c)  $F = 0.5$  e  $U = 4$ ; (d)  $F = 0.75$  e  $U = 4$ . A posição média indica que os elétrons oscilam em torno da sua posição inicial, como no caso cristalino. No entanto, observa-se que o padrão de oscilação para os dois pacotes são diferentes, fato que não ocorria no cristal. Este fato é consequência do campo local ser diferente para as duas posições iniciais. Para uma melhor visualização, recorreremos à figura 3.11, onde podemos ver o comportamento do potencial e do campo local, para as posições iniciais do pacote de onda. Como  $d_0 = 10$  numa cadeia de  $N = 100$  sítios, temos os elétrons inicialmente localizados nos sítios 40 e 60. Utilizando a equação (3.9), o campo efetivo para o elétron posicionado inicialmente no sítio 40 é dado por:

$$F_{ef}^1 = \frac{d\epsilon_n}{dn} + F = -0.02 + F \quad (3.13)$$

e para o elétron posicionado inicialmente no sítio 60 igual à

$$F_{ef}^2 = -0.09 + F \quad (3.14)$$

sendo  $F$  o campo elétrico externo. O efeito do campo local é melhor entendido ao visuali-

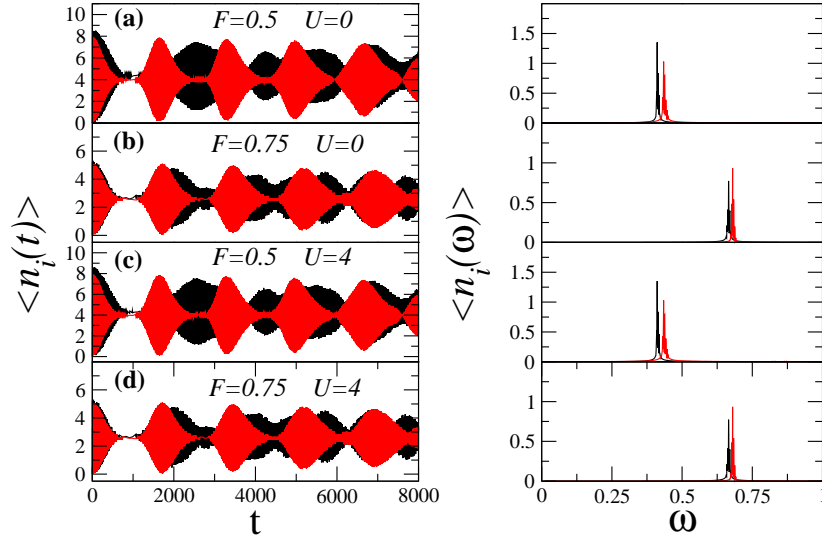


Figura 3.13: Lado esquerdo: Posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  de dois elétrons com  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 10$ . Em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.75$  e  $U = 0$ ; (c)  $F = 0.5$  e  $U = 4$ ; (d)  $F = 0.75$  e  $U = 4$ . Lado direito: Transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  mostra o comportamento oscilatório com frequência  $\omega = F$ .

zamos o espectro da transformada de Fourier. Vemos claramente dois picos de oscilação, correspondendo à frequência de oscilação de cada elétron. Os valores de frequência  $\omega$  são encontrados substituindo os valores do campo elétrico externo nas equações (3.13) e (3.14). Outro aspecto importante apresentado na figura 3.13 é o comportamento oscilatório com frequência  $\omega \approx F$ , independente da interação elétron-elétron. Este fato, proveniente da distância inicial entre os dois elétrons ser muito maior que o comprimento de localização de um elétron, concorda com a literatura[24, 25, 26]. Além disso, vemos que a amplitude de oscilação é menor para valores de campo maiores, concordando com os argumentos semi-clássicos apresentados na seção 2.3, equação (2.96).

Na figura 3.14 podemos ver os resultados, da posição média e da transformada de Fourier, referentes à dois elétrons localizados inicialmente no mesmo sítio, ou seja,  $d_0 = 0$ . Além disso, estes últimos se encontram numa cadeia aperiódica de  $N = 100$  sítios tendo como parâmetros  $V = 1.5$ ,  $2\pi\alpha = 0.5$  e  $\nu = 0.5$ . Vemos em (a)  $F = 0.5$  e  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.5$  e  $U = 4.5$  e (c)  $F = 0.5$  e  $U = 10$ . Na ausência de interação notamos um comportamento oscilatório com frequência  $\omega \approx F$  para cada elétron. Apesar de estarem inicialmente no mesmo sítio, a ausência de interação faz com que os elétrons tenham movimentos independentes. Quando  $U = 4.5$ , a frequência de oscilação predominante para

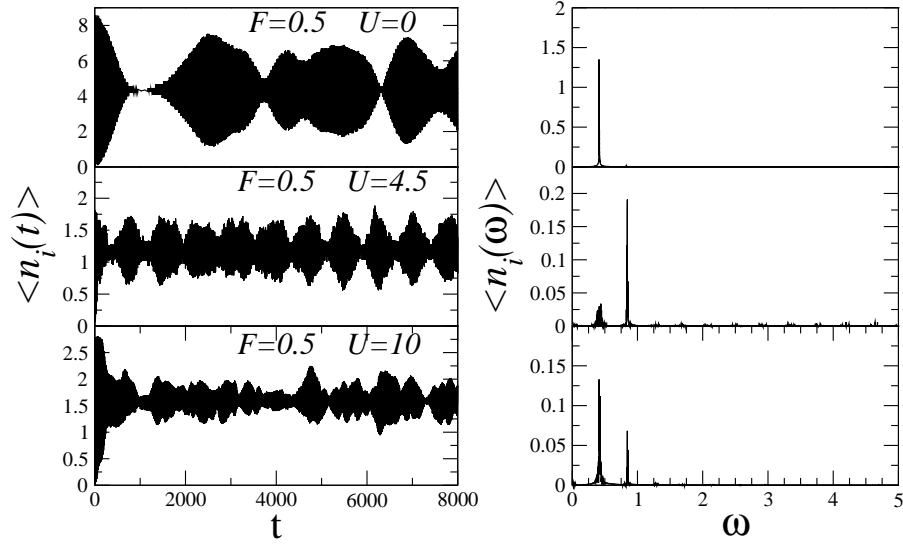


Figura 3.14: Lado direito: Posição média  $\langle n_i(t) \rangle$  de dois elétrons numa cadeia aperiódica de  $N = 120$  sítios, inicialmente dispostos no sítio  $N = 50$ . Lado esquerdo: Transformada de Fourier  $\langle n_i(\omega) \rangle$  apresenta uma frequência de oscilação  $\omega \approx 2F$  para valores intermediários de interação.

os dois pacotes eletrônicos é  $\omega \approx 2F$ . Neste caso, a existência de interação associada ao fato de estarem inicialmente no mesmo sítio, faz com que os elétrons possuam estados ligados. Os estados ligados provocam um comportamento oscilatório coerente, como se fossem uma única partícula de carga  $-2e$ . A existência de uma frequência de oscilação  $\omega \approx F$  de menor amplitude mostra que mesmo possuindo estados ligados, não há uma coerência total de hopping, existindo uma oscilação referente a cada elétron individualmente. A influência do campo local pode ser visto na transformada de Fourier, mostrando uma variação da frequência de oscilação. Dos argumentos semi-clássicos apresentados na seção 2.3, sabemos que valores da amplitude de oscilação são proporcionais à largura da banda. Observando que a amplitude de oscilação decresce em função do aumento da interação, concluímos que a largura da banda de estados ligados diminui à medida que a interação aumenta.

Para estados com forte interação a frequência de oscilação dominante é  $\omega \approx F$ . Para investigarmos este efeito, assim como no caso cristalino, calculamos a média temporal da probabilidade de dupla ocupação para pacotes de onda de diversas larguras, sujeitas à um campo elétrico externo de  $F = 0.5$ . A figura 3.15 apresenta a probabilidade de dupla ocupação para pacotes de onda com diversas larguras, situados inicialmente no mesmo sítio, ou seja,  $d_0 = 0$ . Quando  $\sigma = 0$ , o pacote de onda se torna uma função delta, igual



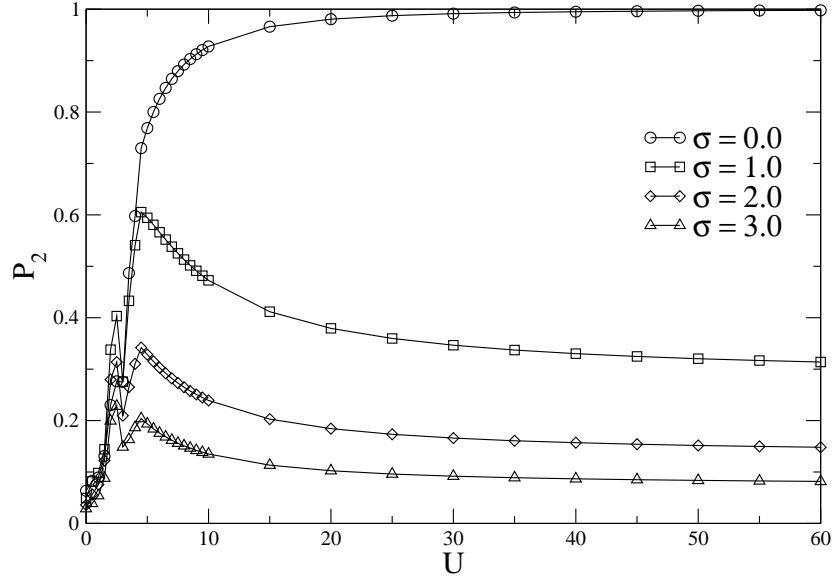


Figura 3.15: Probabilidade de dupla ocupação  $P_2 = \sum_{j=1}^N \langle |f_{j,j}|^2 \rangle$  em função da energia de interação  $U$  para  $\sigma = 0, 1, 2, 3$ . Observa-se um valor máximo para  $P_2$  para valores de  $U \approx 4$ .

ao pacote de onda utilizado na abordagem A1. Dessa forma temos uma probabilidade de dupla ocupação inicial é:  $P_2(t = 0) = 1$ .

Notamos, mesmo na ausência de interação, a existência de uma probabilidade de dupla ocupação diferente de zero. Este fenômeno é decorrente da influência do campo elétrico aplicado, que faz os elétrons oscilarem em torno da sua posição inicial. Devido a sua condição inicial, quando  $U > 0$ , a existência de estados ligados induz um movimento coerente entre os elétrons. A medida que a interação cresce, os estados ligados tornam-se mais influentes, provocando um movimento oscilatório cada vez mais coerente entre os pacotes de onda eletrônicos. Desse modo, para grandes valores de interação,  $P_2 = 1$ .

Quando os pacotes de onda possuem uma largura finita,  $P_2 < 1$ . Os pacotes de onda comportam estados ligados - presentes no centro do pacote de onda; e estados estendidos - dipostos nas extremidades do pacote de onda eletrônico. Como consequência, podemos notar, mesmo na ausência de interação, que a probabilidade de dupla ocupação de pacotes de onda de largura finita é menor que do pacote de onda com  $\sigma = 0$ . Quando a interação se faz presente, esta induz a um comportamento dinâmico coerente entre os elétrons, enquanto o seu caráter repulsivo aumenta a largura do pacote de onda. Quanto maior a largura do pacote de onda, maior a quantidade de estados estendidos, implicando numa

---

menor probabilidade de dupla ocupação. A competição entre o movimento coerente e a repulsão entre os elétrons apresenta um valor máximo para valores de interação próximos à 4. Para valores de interação maiores, o caráter repulsivo domina o comportamento dos pacotes de onda, aumentando a largura dos pacotes e conseqüentemente diminuindo a probabilidade de dupla ocupação.

# Capítulo 4

## Conclusões e Perspectivas

Nos capítulos anteriores foram apresentados vários trabalhos relacionados ao transporte eletrônico. É notável o surgimento de novos ingredientes, visando cada vez mais a compreensão e aprimoramento do conhecimento sobre o comportamento de elétrons em diversos sistemas. Assim como a presença de desordem, a interação elétron-elétron e a influência de um campo externo tem grande relevância no comportamento do pacote de onda eletrônico. Motivados por estudos que mostram o comportamento do elétron sujeito a estes ingredientes, desenvolvemos o estudo apresentado nessa dissertação. Apresentaremos a seguir, de maneira sucinta, os principais resultados obtidos.

O objeto de estudo dessa dissertação foi o comportamento de dois elétrons interagentes, sujeitos à um campo elétrico externo, em estruturas unidimensionais cristalinas e aperiódicas. A existência, na literatura, de duas abordagens diferentes relacionadas ao estudo de elétrons interagentes despertou nosso interesse em estudar ambos os modelos. Em uma das abordagens, os elétrons possuem o mesmo estado de spin, tendo então uma função de onda espacialmente simétrica (A1). A outra abordagem trata os elétrons como totalmente distinguíveis (A2). Os resultados encontrados mostram uma grande semelhança entre as duas abordagens, independente de ser para o caso cristalino ou aperiódico.

A densidade de estados das duas abordagens, na ausência de interação, apresenta um aspecto igual ao do modelo de Anderson tight-binding  $2d$  para um elétron. Ao investigarmos este fato, vimos que isto é proveniente da equivalência entre modelos de  $N$  elétrons interagentes em uma dimensão e modelos com um único elétron em  $N$  dimensões[31]. Quando  $U > 0$ , vimos o surgimento de uma sub-banda de estados ligados, concordando com os resultados analíticos desenvolvidos em [31]. Além disso, nossos resultados mostram

---

que a influência dos estados ligados se dá quando a distância entre os dois elétrons é próxima do comprimento de localização de um único elétron, concordando com os trabalhos [24, 25, 26].

Utilizando na abordagem A2 pacotes de onda eletrônicos com largura finita, vimos que os estados ligados nem sempre dominam o movimento dos elétrons. Para pacotes de onda representados por uma função delta, verificou-se um aumento da probabilidade de encontrarmos dois elétrons no mesmo orbital quanto maior for a interação elétron-elétron. Para pacotes de onda com largura finita, a probabilidade de dupla ocupação apresenta um valor máximo para  $U$  finito. É importante lembrar que os pacotes de onda de largura finita comportam estados ligados e estendidos. Enquanto a interação favorece uma dinâmica coerente dos elétrons, seu caráter repulsivo aumenta a largura do pacote de onda, provocando assim uma diminuição na probabilidade de dupla ocupação. Para pacotes de onda de largura nula, representados por uma função delta, vemos em ambas as abordagens, um aumento da probabilidade de dupla ocupação quanto maior for a interação.

Quando os estados ligados dominam o movimento dos elétrons, observou-se que a frequência de oscilação predominante é  $\omega = 2F$ . Utilizando os argumentos semi-clássicos apresentados no segundo capítulo, concluímos que os dois elétrons se comportam como uma única partícula ligada de carga  $-2e$ . Quando os estados ligados não dominam o movimento, os elétrons oscilam com frequência  $\omega = F$ , indicando um movimento não acoplado.

Os resultados obtidos do sistema aperiódico apresentam grande semelhança com o caso cristalino. A densidade de estados mostra um alargamento da faixa de energias permitidas, fator característico de estruturas não-cristalinas. Nota-se a existência de estados localizados nas extremidades da banda e estados estendidos no centro da mesma. Quando o valor da interação elétron-elétron é maior que zero, nota-se uma sub-banda de estados ligados, com valores próximos da energia de interação  $U$ . No entanto, como a superposição dos níveis energéticos de cada átomo não é feita de maneira coesa, não observamos mais uma separação entre as bandas de energia para grandes valores de  $U$ .

Vimos para alguns valores de interação, um comportamento oscilatório coerente entre os elétrons. Quando os estados ligados dominam o movimento, a frequência de oscilação predominante se torna  $\omega \simeq 2F$ . Quando os estados estendidos dominam o movimento, os elétrons oscilam quase independentes, apresentando uma frequência de oscilação  $\omega \simeq F$ . A diferença entre a frequência de oscilação e o campo elétrico é proveniente da influência do campo efetivo, concordando com o trabalho de Moura *et al* [35]. A probabilidade de

encontrarmos os dois elétrons no mesmo orbital apresenta o mesmo comportamento visto para cadeias cristalinas. Quanto maior a largura do pacote de onda, menor a probabilidade de dupla ocupação, tendo esta um valor máximo para  $U \approx 4$ .

Apesar dos resultados anteriores mostrarem um comportamento semelhante entre as abordagens A1 e A2, pretendemos investigar mais profundamente a abordagem A1. O comportamento de dois elétrons interagentes em sistemas  $2d$  também apresentam fenômenos importantes, podendo ser futuramente um alvo para nossos estudos.

# Apêndice A

## A1 - Trabalhos Submetidos

---

## Bloch oscillations frequency doubling of interacting electrons in a static electric field

W. S. Dias, E. M. Nascimento, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra  
*Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió, AL, Brazil*

We study numerically the effect of the on-site Hubbard interaction  $U$  on the dynamics of two electrons in an periodic chains subjected to an external electric field. We solve the time-dependent Schrodinger equation to follow the time evolution of an initially localized two-electron state. For electrons initially far apart, the wave-packet develops Bloch oscillations whose characteristic frequency is in agreement with a semi-classical calculation. For initially close electrons, a frequency doubling sets up, which is more pronounced for intermediate couplings. We discuss this effect by revealing the opposite trends the electron-electron coupling produces on the wave-packet components corresponding to bounded and unbounded states.

PACS numbers: 71.23.An, 75.10.Jm, 75.40.Gb

### I. INTRODUCTION

The nature of one-electron eigenstates has a significant influence on the electronic properties of solids. In pure periodic systems, the one-electron eigenstates are Bloch waves which are translational invariant and all delocalized in the thermodynamic limit. In the absence of scattering or electron-electron interaction, the system behaves as a perfect conductor whenever the Fermi energy falls into the conduction band. This picture can be drastically changed in the presence of disorder, interactions or a DC external electric field.

In disordered systems, the one-electron eigenstates are obtained using the well-known Anderson Formalism [1–3]. For weak disorder, the electronic states in three dimensional geometries display a localization-delocalization transition (LDT). It was also known that the LDT is absent for low-dimensional systems with time-reversal symmetry at any disorder strength [1]. Some years ago, it was reported that the presence of short [7–10] or long-range correlations [11–20] in disorder induce the appearance of truly delocalized states in low dimensionals. On the other side, when the on-site electron-electron interaction is turned on, the electronic system can be display a correlation-driven transition from a paramagnetic metal to a paramagnetic insulator [21–25]. This transition is called Mott-transition and its basic features can be studied by employing the Hubbard model for electrons interacting with each other through an extremely short-ranged repulsive (Coulomb) interaction [21–25]. The electronic states are also influenced by the presence of a DC electric field. Under this constraint, the electronic wave-packet becomes localized in a finite fraction of the lattice, an effect usually called dynamical localization. The electron wave-packet displays the so-called Bloch oscillations [26–28] whose amplitude is proportional to the bandwidth of the electronic states. Electronic Bloch oscillations were observed for the first time in semiconductor super-lattices [29] (for an overview see Ref. 30). A similar phenomenon of sustained oscillations of the electromagnetic field, named photon Bloch oscillations, was also reported in two-dimensional wave-

guide arrays and optical super-lattices based on porous silicon. [31].

A key problem in condensed matter physics is to understand the electronic transport when the above ingredients (disorder, interaction and electric field) are simultaneously present. The interplay between disorder and dynamical localization due to an electric field was recently studied in ref. [32, 33]. It was numerically proved that coherent Bloch oscillations can appear whenever the disorder distribution displays appropriated long-range correlations in both one- [32] and two-dimensional [33] systems. The problem involving disorder and electron-electron interaction has been a subject of great interest due to their competitive role[34–47]. It has been shown that on-site Coulomb interactions weakens the Anderson localization induced by disorder. In a simpler approach Shepelyansky[34] pioneered the study of two interacting electrons moving in a disordered one dimensional (1D) system and obtained an enhanced propagation effect of an interacting electron pair over distances larger than the single-particle localization length, as indeed predicted in disordered mesoscopic rings threaded by magnetic flux[36].

Recently, the interplay of dynamical localization and electron-electron interaction was reported in ref. [48–51]. By using numerical and analytical calculations the problem involving  $N$  interacting electrons moving along a chain and subject to an external electric field was studied in ref.[48]. It was shown that the  $N$ -particle problem is identical to that of a single particle moving in an  $N$ -dimensional lattice, with defect surfaces dividing the space in symmetric domains. The authors have shown that at limit of weak hopping integral, the electron-electron interaction induces a kind of oscillations in the eigenstates drift velocity. The period of this oscillation was found to be determined solely by the interaction range and strength.[48]. The spectral properties of the Bose-Hubbard Hamiltonian under the additional action of a static field was studied in ref.[49]. The authors have shown that for intermediate strengths of the static field, arises a rapid decay of the Bloch oscillations of the mean atomic momentum. It was also shown that the time scale of this decay provides a direct measure for the decay of

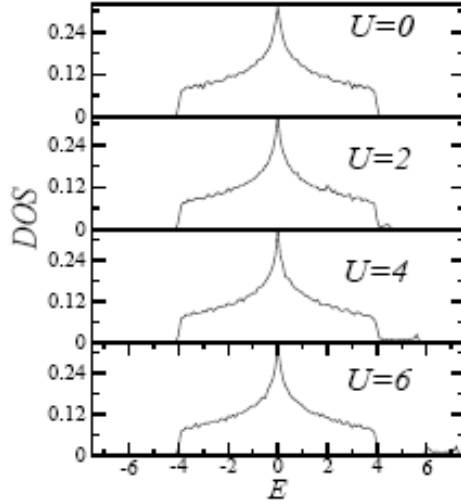


FIG. 1: Normalized density of states  $DOS$  versus energy  $E$  for  $U = 0, 2, 4$  and  $6$  computed in a open periodic chain ( $\epsilon_n = 0$  for all  $n$ ) with  $L = 100$  sites. For  $U = 0$  the density of states is exactly the same obtained from the tight-binding two-dimensional  $2D$  Anderson Hamiltonian for one electron in a square lattice geometry. For  $U > 0$  a sub-band of bounded states starting around  $E = U$  appears.

particle-particle coherences across the lattice[49]. By using an extended dynamical mean-field theory[50], the effect on a large electric field on interacting electrons was studied. It was numerically demonstrated that the Bloch oscillations decay due to electron correlations.

In this paper we contribute along this line by providing a detailed analysis of the phenomenon of electronic Bloch oscillations in periodic low-dimensional systems with two interacting electrons. To this end, we focus on the electric-field biased wave-packet dynamics of two electrons moving in a 1D pure chain. We use numerical methods to solve the Schrödinger equation and compute the density of states, the stationary eigen-states and follow the time-evolution of the two-electrons wave-packet. Starting from an initial Gaussian wave-packet, we show that the electric field promotes sustained Bloch oscillations, whose predominant mode displays a frequency doubling depending on the relative contributions coming from bounded and unbounded states. The values for the characteristic frequency and amplitude of the Bloch oscillations will be discussed under the light of a semi-classical approach.

## II. MODEL AND FORMALISM

The Anderson-Hubbard tight-binding equation for two interacting electrons in the presence of a static and uni-

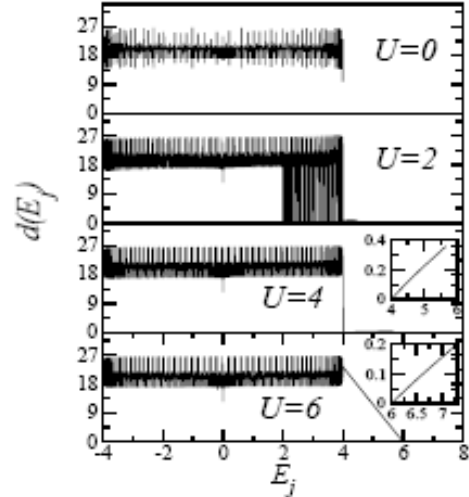


FIG. 2: The average distance  $d(E_j)$  between the two electrons versus energy  $E$  for  $U = 0, 2, 4$  and  $6$  computed in a open periodic chain ( $\epsilon_n = 0$  for all  $n$ ) with  $L = 100$  sites. For  $U > 0$  the eigenstates within the sub-band have small distances  $d(E_j)$  reflecting the bounded nature of these states.

form electric field  $F$  is given by [46, 47]

$$H = \sum_n \sum_s W(c_{n+1,s}^\dagger c_{n,s} + c_{n,s}^\dagger c_{n+1,s}) \quad (1) \\ + \sum_n \sum_s [\epsilon_n + eFxn] c_{n,s}^\dagger c_{n,s} \\ + \sum_n U c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}$$

where  $c_{n,s}$  and  $c_{n,s}^\dagger$  are the annihilation and creation operators for the electron at site  $n$  with spin  $s$ ,  $n$  is the position operator,  $W$  is the hopping amplitude and  $e$  is the electron charge. In order to follow the time evolution of wave-packets, we have solved the time dependent Schrödinger equation by expanding the wave function in the Wannier representation

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2} |n_1 s_1, n_2 s_2\rangle \quad (2)$$

where the ket  $|n_1 s_1, n_2 s_2\rangle$  represents an electron with spin  $s_1$  at site  $n_1$  and the other with spin  $s_2$  at site  $n_2$ . In order to allow for double occupancy of the on-site orbital, we will consider in the following that the electrons are in distinct spin states. Once the initial state is prepared as a direct product of states regarding each electron, they will always be distinguishable by their spins since the Hamiltonian does not involve spin exchange interactions. The time evolution of the wave function becomes in the



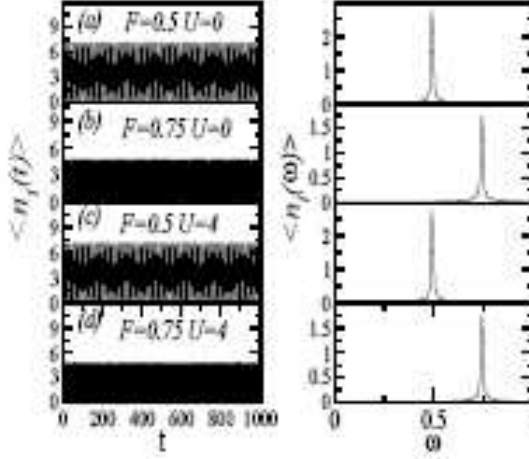


FIG. 3: Left panel: centroid  $\langle n_i(t) \rangle$  computed using  $L = 120$  sites,  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 10$  and (a)  $F = 0.5$ ,  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.8$ ,  $U = 4$ ; (c)  $F = 0.75$ ,  $U = 0$ ; (d)  $F = 0.75$ ,  $U = 4$ . The Fourier transform (see right panel)  $\langle n_i(\omega) \rangle$  clearly shows that the centroid displays an oscillatory pattern with frequency close to  $\omega = F$ .

Wannier representation

$$\frac{d\langle n_{1,2}(t) \rangle}{dt} = f_{n_1+1, n_1} + f_{n_1-1, n_1} + f_{n_1, n_1+1} + f_{n_1, n_1-1} + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} + eF a)(n_1 + n_2) + \delta_{n_1, n_2} U f_{n_1, n_2} \quad (3)$$

where we used units of  $\hbar = W = \epsilon = a = 1$ . The on-site energies  $\epsilon_n$  will be taken as the reference energy ( $\epsilon_n = 0$ ) without any loss of generality. The above set of equations were solved numerically by using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator  $V(\Delta t)$ :

$$V(\Delta t) = \exp(iH \Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(iH \Delta t)^l}{l!} \quad (4)$$

where  $H$  is the Hamiltonian. The time-dependent wavefunction at time  $t$  is given by  $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$ . The method can be used recursively to obtain the wavefunction at time  $t$ . The following results were taken by using  $\Delta t = 0.05$  and the sum was truncated at  $n_0 = 20$ . This cutoff was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered. We followed the time-evolution of an initially Gaussian wave-packet with width  $\sigma$ :

$$\langle n_1 s_1, n_2 s_2 | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp[-(n_1 - n_1^0)^2 / 4\sigma^2] \times \exp[-(n_2 - n_2^0)^2 / 4\sigma^2] \quad (5)$$

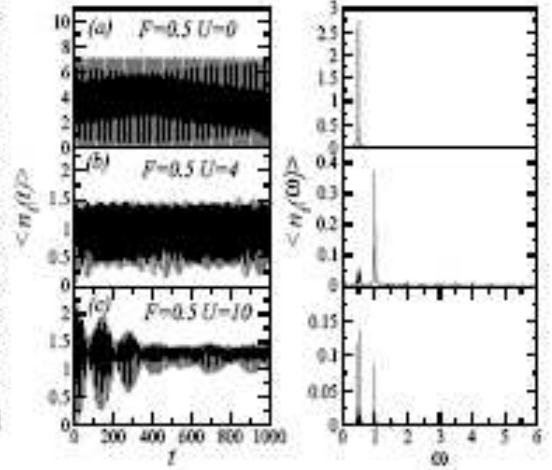


FIG. 4: Left panel: centroid  $\langle n_i(t) \rangle$  computed using  $L = 120$  sites,  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 0$ ,  $F = 0$  and (a)  $U = 0$ ; (b)  $U = 4$ . For  $U = 0$  the centroid displays an oscillatory pattern with frequency close to  $\omega = F$ . For  $U = 4$  the Fourier transform  $\langle n_i(\omega) \rangle$  clearly shows that the centroid displays an oscillatory pattern with a predominant frequency close to  $\omega = 2F$ .

and computed the centroid of both electrons defined as :

$$\langle n_i(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} (n_1 - n_1^0) |f_{n_1, n_2}(t)|^2, \quad i = 1, 2 \quad (6)$$

The initial positions  $(n_1^0, n_2^0)$  will be considered to be centered at  $(N/2 - d_0, N/2 + d_0)$ . In addition, we will apply a numerical diagonalization procedure of the complete Hamiltonian in the absence of electric field to obtain all eigenvectors  $|\Phi^j\rangle = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2}^j |n_1 s_1, n_2 s_2\rangle$  and eigenvalues  $E_j$ . Further, we will compute the density of states given by  $DOS(E) = \sum_j \delta(E - E_j)$  and the average distance  $d(E_j)$  between the two electrons  $d(E_j) = \sum_{n_1, n_2} |n_2 - n_1| |f_{n_1, n_2}^j|^2$ . The average distance brings information regarding the correlation between the two electrons so that a small  $d(E_j)$  signals a bounded two-electron eigenstate.

### III. RESULTS

We apply our numerical diagonalization to an open chain with  $L = 100$  sites. In Fig. 1, we show results for the normalized density of states  $DOS$  versus energy  $E$  for  $U = 0, 2, 4$  and  $6$ . For  $U = 0$  the density of states is exactly the same obtained from the tight-binding two-dimensional  $2D$  Anderson Hamiltonian for one electron. For  $U > 0$ , we have found a new sub-band covering the interval  $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16W^2}$ . For  $U \ll 4W$  the new

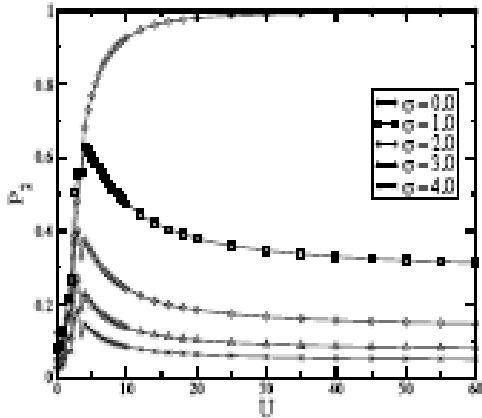


FIG. 5: The double occupation probability  $P_2 = \sum_{i,j=1}^L |f_{i,j}|^2$  versus  $U$  for  $\sigma = 0, 1, 2, 3$  and  $4$ .

sub-band is merged with the two-dimensional DOS for  $U = 0$ . For  $U \approx 4W$ , the new sub-band is clear. All previous results are in perfect agreement with analytical calculations of ref. [48]. In Fig. 2, we show the distance  $d(E_j)$  of the two electrons versus energy  $E_j$  for  $U = 0, 2, 4$  and  $6$ . For  $U > 0$  the eigenstates within the sub-band display small average distances  $d(E_j)$ . Therefore, the eigenstates within the sub-band are bounded (pairing) eigenstates. In the left panel of Fig. 3, we show results for the centroid  $\langle n_0(t) \rangle$  computed using  $L = 120$  sites,  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 10$  and (a)  $F = 0.5$ ,  $U = 0$ ; (b)  $F = 0.5$ ,  $U = 4$ ; (c)  $F = 0.75$ ,  $U = 0$ ; (d)  $F = 0.75$ ,  $U = 4$ . The centroid displays an oscillatory pattern. The Fourier transform (see right panel)  $\langle n_0(\omega) \rangle$  clearly shows that the predominant oscillation frequency is close to previous predictions using semi-classical arguments  $\omega = F$  [32]. For large initial electron-electron distances  $d_0 \gg \sigma$  the Bloch oscillations do not depend on the Coulomb interaction  $U$  once the wave-packet remains trapped by the electrical field around its initial position for which the double occupancy probability is vanishingly small. In fig 4, we show results for the centroid  $\langle n_0(t) \rangle$  computed using  $L = 120$  sites,  $\sigma = 1$ ,  $d_0 = 0$ ,  $F = 0.5$  and (a)  $U = 0$ , (b)  $U = 4$  and (c)  $U = 10$ . For  $U = 0$  the centroid displays an oscillatory pattern with frequency close to  $\omega = F$ . For  $U = 4$  the Fourier transform  $\langle n_0(\omega) \rangle$  clearly shows that the centroid displays an oscillatory pattern with a predominant frequency close to  $\omega = 2F$ . For much stronger interactions, the  $\omega = F$  frequency is re-amplified.

In order to understand the role played by the electron-electron interaction in the emergence of such frequency doubling process for intermediate interactions, we computed the long-time average of the double occupancy probability  $P_2 = \sum_{i,j=1}^L \langle |f_{i,j}(t)|^2 \rangle$  as a function of the Coulomb interaction  $U$  for several initial wave-packet

widths  $\sigma = 0, 1, 2, 3$  and  $4$ , as reported in fig 5. For  $\sigma = 0$ , both electrons are initially placed at the central site, in such a way that the initial double occupancy is  $P_2(t=0) = 1$ . Whenever  $U = 0$ , the electron wave-packets spread independently, although remaining trapped over a finite segment due to the presence of the external field. Therefore, the long-time double occupancy probability becomes small (of the order of the inverse asymptotic wave-packet width). As the interaction is turned on, the emergence of bounded states correlates the two electrons dynamics. For large interaction strengths, the initial state is mostly superposed to bound states and, therefore, the double occupancy remains close to unity. This means that the two-electrons behaves as a single particle executing coherent hoppings.

In the cases for which the initial wave-packet has a finite width, the initial double occupancy probability is smaller than one. At finite interaction strengths  $U$ , the contributions coming from the wave-packet superposition with bounded and unbounded states have opposite trends. While the interaction favors the coherent hopping associated with bounded states, its repulsive character enhances the wave-packet width. Such enhanced spread decreases the double occupancy probability coming from the superposition of unbounded states. This competition results in a non-monotonic dependence of  $\langle P_2 \rangle$  on the Coulomb interaction  $U$  obtained in fig 5 for finite initial wave-packet widths. The interaction potential  $U$  corresponding to the maximum of the double occupancy probability represents also the physical situation of maximal coherence between the two electrons hopping. This maximum double occupancy probability, as well as the characteristic Coulomb interaction are decreasing functions of the initial wave-packet width.

According to the above analysis, the wave-packet component corresponding to bounded states will have a dynamical evolution typical of a single particle composed of the electron pair. As such, the effective local electrical potential felt by this composed particle will be  $2F$ , thus explaining the observed frequency doubling. This effect becomes more pronounced for intermediate couplings producing maximal double occupancy. Another signature of the competition between bounded and unbounded states is also clearly seen in the own time evolution of the one-particle centroid. According to the semi-classical prediction, the amplitude of the centroid oscillations shall be proportional to the bandwidth. In Fig 4 one sees that the relation between the oscillation amplitudes for  $U = 0$  (unbounded states) and  $U = 4$  (predominance of bounded states) reflects the ratio between the width of the bounded and unbounded energy bands.

#### IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

In summary, we studied the one-dimensional dynamics of two interacting electrons with opposite spins under the influence of a static uniform electrical field  $F$ .

When the electrons are far apart, they develop Bloch oscillations induced by the applied field whose characteristic frequency is given by  $\omega = eF_0/\hbar$  according to a semi-classical approach, where  $e$  is the electron charge and  $a$  the lattice spacing. For electrons whose initial wave-packets present a significant spatial superposition with each other, the Bloch oscillations develop a frequency doubled component which is more pronounced at intermediate couplings. By computing the asymptotic double occupancy probability, we revealed two opposite trends that the electron-electron interaction produces on the wave-packet dynamics. For the components associated with bounded states the Coulomb interaction keeps the electrons paired and produce coherent hoppings. For the unbounded components, the repulsive character of the interaction enhances the wave-packet width thus diminishing the double occupancy probability. The competition between these two effects leads to an optimal coupling strength to obtain a coherent dynamics of the two-electron system. The coupled electrons effectively

behaves as a single particle with charge  $2e$  which explains the frequency doubling of the Bloch oscillations. The here reported frequency doubling induced by two-particle interaction seems to be a quite general phenomenon and can possibly be found in other systems with bounded states, as for example for interacting spin-waves and phonons. It shall also be relevant to the analysis of the interplay between interaction and disorder in what concerns to the localization theory of interacting electrons.

## V. ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES and FINEP, Rede nanobiosstruturas, as well as by the Alagoas state research agency FAPEAL.

- 
- [1] B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56** 1469, (1993); E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979). For a review see, e.g., I. M. Lifshitz, S. A. Gredskul and L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1983).
- [2] B. Huckestein and L. Schweitzer, Phys. Rev. Lett., **72** 713 (1994).
- [3] R. Ketzmerich, K. Kruss, S. Kraut and T. Geisel, Phys. Rev. Lett., **79** 1959 (1997).
- [4] K. Slevin and T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 (1999).
- [5] K. Slevin and T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **78**, 4083 (1997).
- [6] Y. Asada, K. Slevin and Tomi Ohtsuki, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, Suppl. 258 (2005).
- [7] J. C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 8471 (1989).
- [8] D. H. Dunlap, H. L. Wu, and P. W. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 88 (1990); H.-L. Wu and P. Phillips, *ibid.* **66**, 1268 (1991); P. W. Phillips and H.-L. Wu, Science **262**, 1808 (1991).
- [9] A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 3728 (1994); A. Sánchez, E. Mascá, and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **49**, 147 (1994).
- [10] F.A.B.F. de Moura, M.N.B. Santos, U.L. Fulco, M.L. Lyra, E. Lazo, M.E. Ouel, Eur. Phys. J. B **36**, 81 (2003); S.S. Albuquerque, FAEF de Moura, M.L. Lyra, E. Lazo Phys. Lett. A **366**468 (2006).
- [11] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3738 (1998); Physica A **266**, 485 (1999).
- [12] F. M. Izrailev and A. A. Krokchin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999); F. M. Izrailev, A. A. Krokchin, and S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 41102 (2001).
- [13] G. P. Zhang and S.-J. Xiong, Eur. Phys. J. B **29**, 481 (2002).
- [14] A. Krokchin, F. Izrailev, U. Kuhl, H.-J. Stöckmann, and S. E. Ulloa, Physica E **13**, 698 (2002).
- [15] W. S. Liu, T. Chen, and S. J. Xiong, J. Phys. Condens. Matter **11**, 6883 (1999); Wen-Shang Liu, S. Y. Liu and X. L. Lei, Eur. Phys. J. B **33**, 293 (2003).
- [16] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, and M. L. Lyra, Phys. Rev. **68**, 012202 (2003).
- [17] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra, Europhys. Lett. **66**, 635 (2004).
- [18] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, F. Oliveira, R. Morgado, Mendli Physica Letters A, **359** 33 (2005).
- [19] V. Bellini, E. Dier, A. Faisini, L. Tarricone, R. Hay, G. B. Parravicini, and F. Domínguez-Adame, Physica E **7**, 823 (2000).
- [20] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. Krokchin, and H. J. Stöckmann, Appl. Phys. Lett. **77**, 433 (2000).
- [21] M.L. Lyra, M. D. Coutinho-Filho and A.M. Nazaretsky, Phys. Rev. B **48**, 3783 (1993).
- [22] H. Tasaki, J. Phys.: Condens. Matter **10** (1998) 4383.
- [23] D.C. Mattis, M. Diezmann and X. Zotos, Phys. Rev. B **42**, 6788 (1990).
- [24] K. Held, G. Keller, V. Eyert, D. Vollhardt, and V. I. Anisimov Phys. Rev. Lett. **86**, 5348 (2001).
- [25] M. Potthoff and W. Nolting, Phys. Rev. **69**, 2549 (1999).
- [26] F. Bloch, Z. Phys. **62**, 858 (1927).
- [27] G. H. Wannier, Phys. Rev. **100**, 1227 (1955); Phys. Rev. **101**, 1838 (1956); Phys. Rev. **117**, 432 (1960); Rev. Mod. Phys. **34**, 646 (1962).
- [28] D. H. Dunlap and V. M. Kenkre, Phys. Rev. B **34**, 3825 (1986).
- [29] K. Leo, P. Hairing, F. Brüggemann, R. Schwedler, and K. Köhler, Solid State Commun. **84**, 943 (1992).
- [30] K. Leo, Semicond. Sci. Technol. **13**, 249 (1998).
- [31] V. Agarwal, J. A. Del-Río, G. Malpuech, M. Zanfiraco, A. Krokchin, D. Conquillat, D. Scalart, M. Vladimircova, and B. Gil, Phys. Rev. Lett. **92**, 097401 (2004).
- [32] F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **91**, 197402 (2003).
- [33] F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, F. Domínguez-Adame, and V. A. Malyshev, J. Phys.: Condens. Matter **19**,

- 056204 (2007).
- [34] D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. 73, 2807 (1994).
- [35] Y. Imry, Europhys. Lett. 30, 405 (1995).
- [36] K. Frahm, A. Müller-Groding, J.-L. Pichard and D. Weinmann, Europhys. Lett. 51, 169 (1995).
- [37] P. Jacquod and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. 76, 3501 (1996).
- [38] Y. V. Fyodorov and A. D. Mirlin, Phys. Rev. B 62, R11880 (1998).
- [39] K. Frahm, A. Müller-Groding and J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. 76, 1509 (1996).
- [40] M. Leadbeater, R.A. Romer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B 8 643 (1999).
- [41] K. Frahm, Eur. Phys. J. B 10 371, (1999).
- [42] O. Halfpap, Ann. Phys. 10 623 (2001).
- [43] A. Eilmes, R.A. Romer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B 28 229 (2001).
- [44] A. Eilmes, U. Geismar, R.A. Romer et al Eur. Phys. J. B 8 547 (1999).
- [45] R. A. Romer and M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. 78, 515 (1997).
- [46] S. N. Evangelou, Shi-Jie Xiong, and E. N. Economou, Phys. Rev. B, 54, 8469 (1996).
- [47] S. N. Evangelou and D. Katsanos, Phys. Rev. B, 56, 12797 (1997).
- [48] F. Claro, J. F. Weisz, and S. Curilef, Phys. Rev. B. 67, 155101 (2003).
- [49] Andreas Buchleitner<sup>1</sup> and Andrey R. Kolovsky, Phys. Rev. Lett. 91, 253002 (2003).
- [50] J. K. Freericks,<sup>1</sup> V. M. Turkowski,<sup>1</sup> and V. Zlatić, Phys. Rev. Lett. 97, 268408 (2006).
- [51] Gao Xianlong, Marco Polini,<sup>8</sup> and M. P. Tosi Vivaldo L. Campo, Jr., Klaus Capelle, Marcos Rigol<sup>1</sup>, K. Freericks, Phys. Rev. B. 78, 168120 (2008).

# Referências Bibliográficas

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello e T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [3] Richard Zallen, *The physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York, 1983)
- [4] I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul e L. A. Pastur, *Introductio to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988)
- [5] B. Kramer e A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)
- [6] T. V. Ramakrishman e P.A. Lee, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985)
- [7] Mahito Kohmoto, Phys. Rev. Lett. **51**, 1198 (1983).
- [8] J.C. Flores, J. Phys. Condens. Matter. **1**, 8471 (1989).
- [9] D.H. Dunlap, H.L Wu e P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [10] F.A.B.F de Moura and M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett, **81**, 3735 (1998).
- [11] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, E.D. Siggia, Phys. Rev. Lett. **50**, 1873 (1983).
- [12] M.Ya. Azbel, Phys. Rev. Lett. **43**, 1954 (1979)
- [13] J.B. Solokoff, Phys. Rev. B. **22**, 5823 (1980)
- [14] C.M. Soukoulis and E.N. Economou, Phys. Rev. Lett. **48**, 1043 (1982).
- [15] D.R. Grempel, S. Fishman, and R.E. Prange, Phys. Rev. Lett. **49**, 833 (1982).

- 
- [16] M. Griniasty e S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988).
- [17] S. Das Sarma, Song He e X. C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988).
- [18] D. J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988).
- [19] S. Das Sarma, Song He, and X. C. Xie, Phys. Rev. B. **41**, 5544 (1990)
- [20] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A276** (1963) 238; *ibid* **A277** (1964) 237; *ibid* **A281** (1964) 401
- [21] Mott, N.F. *Metal-Insulator Transitions* Taylor and Francis, London (1974).
- [22] N.F. Mott and E.A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials* (Clarendon Press, Oxford, 1971)p.121
- [23] N.F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (academic Press, London, 1985).
- [24] D.L. Shepelyansk, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994)
- [25] K. Frahm, A. Muller-Groeling, and J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **76**, 1509 (1996).
- [26] D. Weinmann, A. Muller-Groeling, J.-L. Pichard, and K. Frahm, Phys. Rev. Lett, **75**, 1598 (1995).
- [27] S.N. Evangelou, S.J. Xiong, and E.N. Economou, Phys. rev. B, **54**, 8469 (1996).
- [28] S.N. Evangelou and D.E. Katsanos, Phys. Rev. B, **56**, 12797 (1997).
- [29] P.E. Brito, E.S. Rodrigues, and H.N. Nazareno, Phys. Rev. B, **73**, 014301 (2006).
- [30] R.A. Römer and M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **78**, 515 (1997).
- [31] F. Claro, J.F. Weitz, and S. Curilef, Phys. Rev. B **67**, 193101 (2003).
- [32] D.K. Ferry and S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge, New York, 1997)
- [33] K. Leo, *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 249 (1998).
- [34] F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F de Moura e M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **91**, 197402 (2003).

- 
- [35] F.A.B.F de Moura, M.L. Lyra, F. Domínguez-Adame e V.A. Malyshev, *Phys. Rev. B* **71**, 104303 (2005).
- [36] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishers, New York, 1976), p.213.
- [37] V. Agarwal, J.A. del Río, G. Malpuech, M. Zamfirescu, A. Kavokin, D. Coquillat, D. Scalbert, M. Vladimirova, and B. Gil, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 097401 (2004).
- [38] D.M. Cláudio e J.M. Martins, *Cálculo Numérico Computacional*, (Editora Atlas 1994)
- [39] D. J. Thouless, *Physics Reports* **13**, 93 (1974).
- [40] S. N. Evangelou and A. Z. Wang, *J. Phys: Condens. Matter* **4**, L617-L622 (1992)
- [41] S. N. Evangelou and D.E. Katsanos, *Phys.Lett.A* **164**, **456** (1992)
- [42] H. Aoki e T.Ando, *Solid State Commum*, **18**, 1981 (1079)
- [43] S. Etamad, R. Thompson e M. J. Andrejco, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 575 (1986)
- [44] E. Akkermans e R. maynard, *J. Phys. Lett.* **46** L1045 (1985)
- [45] P.E. Lindelof, J. Norregaard e J. Hanberg, *Phys. Scr.* **T14**, 17 (1986)
- [46] D. Belitz e T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 281 (1994).
- [47] G. A. Thomas e M. A. Paalanen, *Recent Developments in the Metal-Insulator Transition em Localization, Interaction and Transport Phenomena*, Spring Series in Solid-State Sciences. ed. B. Kramer, G. Bergmann e Y.Bruynseraede, **61** p. 77 (1984).
- [48] S. Bogdanovivh, M. P. Sarachik e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 137 (1999).
- [49] D. Ferry e S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press 1997. Cap. 3, p. 174.
- [50] A. Chomette, B. Deveaud, A. Regreny and G. Bastard, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1464 (1986).
- [51] Y.A. Zhang, J.A. Strozier, Jr.,and A. Ignatiev, *Phys. Rev. B.* **53**, 7426 (1996).

- 
- [52] A.Sánchez, E. Maciá and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B, **49**, 147 (1994).
- [53] E.Diez, A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B, **50**, 14359 (1994).
- [54] F. Domínguez-Adame, A. Sánchez and E. Diez, Phys. Rev. B, **50**, 17736 (1994).
- [55] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F.Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá, Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999).
- [56] U. Kuhl and H.-J. Stöckmann, Phys. Rev. Lett. **80**, 3232 (1998).
- [57] U.Kuhl, F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, H.-J. Stöckmann, App. Phys. Lett. **77** 633.
- [58] F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1928).
- [59] G.H.Wannier, Phys. Rev. **100**, 1227 (1955) **101** 1835 (1956); **117**, 432 (1960); Rev. Mod. Phys. **34**, 645 (1962).
- [60] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Franck Laloë, *Quantum Mechanics*, vol. II, John Wiley (1977).
- [61] D.H. Dunlap e V.M.Kenkre, Phys. Rev. B **34**, 3625 (1986).
- [62] A.F.R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica* (ed. USP, São Paulo, 2003), p.299.
- [63] J.Leite Lopes, *A Estrutura Quântica da Matéria*(ed. UFRJ, Rio de Janeiro, 1993) p.489.