



**Universidade Federal de Alagoas**  
Instituto de Física  
Pós-Graduação em Física da Matéria Condensada

**Speckles em sistemas de partículas interagentes**

**MATHEUS FELIPE VIEIRA DE OLIVEIRA**

Maceió  
2024

MATHEUS FELIPE VIEIRA DE OLIVEIRA

## Speckles em sistemas de partículas interagentes

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

Orientador : Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida

Maceió

2024

**Catálogo na Fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

- O48s Oliveira, Matheus Felipe Vieira de.  
*Speckles* em sistemas de partículas interagentes / Matheus Felipe Vieira de Oliveira. – 2024.  
94 f. : il. color.
- Orientador: Guilherme Martins Alves de Almeida.  
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2024.
- Bibliografia: f. 75-82.  
Apêndices: f. 83-94.
1. Sistema quântico interagente. 2. Partículas idênticas. 3. *Speckles*. 4. Partículas (Física, química, etc.) - Desordem. I. Título.

CDU: 535.14

---

*Dedico esta dissertação  
aos meus amores Joatas, Shakira e Shelda.*

---

# Agradecimentos

Quero expressar minha sincera gratidão à minha família pelo apoio constante ao longo dos anos. Em particular, gostaria de agradecer à minha mãe, Mônica, e ao meu irmão, Joatas. Seu amor, carinho e orientação moldaram quem sou hoje. Sou profundamente grato por tudo o que fizeram por mim e pela pessoa que me ajudaram a me tornar.

À Shakira, minha noiva, agradeço por sempre estar ao meu lado. Cada desafio, cada momento de incerteza, foi suavizado pela sua presença reconfortante e pelo seu apoio inabalável. Você não apenas me deu seu amor, mas também compartilhou sua sabedoria, paciência e compreensão. Sua capacidade de me inspirar, de me fazer rir mesmo nos momentos mais difíceis, é algo que guardarei para sempre em meu coração. Sua presença ao meu lado durante esses dois anos de mestrado tornou essa jornada mais suportável. Seu amor e apoio são verdadeiramente preciosos, e sou imensamente grato por tê-los em minha vida.

Gostaria de expressar minha sincera gratidão à minha querida cunhada, Shelda, pelos momentos incrivelmente divertidos que compartilhamos juntos. Sua energia contagiante e seu senso de humor único sempre trouxeram luz e alegria aos nossos encontros. Cada risada compartilhada e cada memória criada ao seu lado são verdadeiros tesouros que guardarei para sempre em meu coração. Obrigado por ser uma presença tão positiva e por tornar nossa relação ainda mais especial com sua companhia calorosa e divertida.

Aos meus amigos: Lavínia, Yuri(é com "e"mas eu escrevo com "i"), Luciano, Pâmela, Catarina, Walter, Katiele, Nicolas, Mariana, Eugene, Ana, Adenilson, Max, Ralina. Que fizeram parte desse jornada de alguma forma, cada um de vocês contribuiu para tornar essa jornada acadêmica e pessoal mais significativa e enriquecedora. Obrigada por todas as risadas que vocês me proporcionaram. Sem a presença e o suporte de vocês, essa jornada teria sido muito mais desafiadora. Um obrigado especial a Mari, por ter me ajudado muito mais do que ela imagina.

Quero dedicar um agradecimento especial a três amigos que estiveram ao meu lado no convívio diário durante esse período. Lavínia, Yuri e Luciano, vocês foram mais do que amigos; foram verdadeiros companheiros de jornada. Compartilhamos inúmeros momentos de alegria e desespero, risos e lágrimas, e vocês estiveram lá para celebrar as vitórias e apoiar nos momentos difíceis. Agradeço do fundo do coração por toda a solidariedade, compreensão e cumplicidade que demonstraram em cada conversa, em cada desafio enfrentado. Vocês são parte essencial da minha vida e sou eternamente grato pelo apoio inabalável que sempre me ofereceram. Obrigado por serem os melhores amigos que alguém poderia desejar.

Gostaria de expressar minha sincera gratidão ao meu estimado orientador pelos ensinamentos preciosos que ultrapassaram os limites do conhecimento acadêmico e enriqueceram significativamente minha vida. Além disso, quero agradecer sinceramente pela sua paciência infinita ao longo deste processo. Seu apoio e incentivo foram fundamentais para a minha jornada. Estou profundamente grato pela oportunidade de aprender e crescer sob sua orientação.

Aos membros do grupo que faço parte QuantUFAL, que cresceu bastante durante o meu período de mestrado.

Agradeço a Deus por me conceder força e saúde para chegar até este ponto e por possibilitar a existência de tantas pessoas importantes em minha vida.

Agradeço também as agencias de fomento: CAPES, CNPq e FAPEAL.

---

*“Eu não disse a vocês ? Amigo ou inimigo, bom ou mau,  
Deus ou Humano. Não importa quem você é... porque,  
neste mundo inteiro, eu sou apenas eu!”*

*Buddha, Shuumatsu no Valkyrie.*

---

# Resumo

A dinâmica de duas partículas quânticas interagindo em uma cadeia fracamente desordenada é investigada. A interferência quântica espacial entre elas é caracterizada através da estatística das amplitudes de transição de duas partículas, relacionadas às correlações de Hanbury Brown-Twiss na óptica. O perfil de flutuação do sinal pode discernir se as partes interagentes estão se comportando como bósons idênticos, férmions ou partículas distinguíveis. Um regime de speckle analógico totalmente desenvolvido, exibindo estatísticas de Rayleigh, é alcançado para bósons interagentes. Desvios em direção a distribuições de cauda longa ecoam correlações quânticas semelhantes a partículas idênticas não interagentes. No limite de interação forte, os estados ligados de duas partículas obedecem a distribuições de Rician compostas.

**Palavras-chave:** Sistemas quânticos interagentes, Partículas idênticas, Speckles, Desordem.

---

# Abstract

The dynamics of two interacting quantum particles on a weakly disordered chain is investigated. Spatial quantum interference between them is characterized through the statistics of two-particle transition amplitudes, related to Hanbury Brown-Twiss correlations in optics. The fluctuation profile of the signal can discern whether the interacting parties are behaving like identical bosons, fermions, or distinguishable particles. An analog fully developed speckle regime displaying Rayleigh statistics is achieved for interacting bosons. Deviations toward long-tailed distributions echo quantum correlations akin to noninteracting identical particles. In the limit of strong interaction, two-particle bound states obey compound Rician distributions.

**Keywords:** Interacting quantum systems, Identical particles, Speckles, Disorder.

# Lista de Figuras

2.1	Padrão de speckls. . . . .	4
2.2	Processo de formação dos speckles ao analisarmos a luz refletida de uma superfície rugosa. Devido ao processo de reflexão da luz, observamos que a luz incidente se propaga em diversas direções (representadas pelo sombreado vermelho); entretanto, estamos particularmente interessados apenas naquelas que conseguimos observar no ponto de observação $P$ . . . . .	5
2.3	A imagem de radar de abertura sintética de Moffett Field, Califórnia, mostra granulação intensa. . . . .	6
2.4	Imagem de ultrassom (2,5 MHz) do fígado humano mostrando granulação. . . . .	7
2.5	Caminhadas aleatórias (a) soma construtiva e (b) soma destrutiva. . . . .	8
2.6	(a) Uma onda estatisticamente estacionária mantém uma intensidade média $I(x, y; t)$ constante ao longo do tempo. (b) Em contraste, uma onda estatisticamente não estacionária possui uma intensidade média $I(x, y; t)$ que varia conforme o tempo. Esses gráficos podem ilustrar, por exemplo, a intensidade da luz gerada por uma lâmpada incandescente alimentada por (a) uma corrente elétrica constante e (b) um pulso de corrente elétrica. . . . .	10
2.7	Gráfico de contorno representando a densidade de probabilidade constante para uma variável aleatória gaussiana complexa circular. O eixo ' $\mathcal{R}$ ' representa a parte real, enquanto o eixo ' $\mathcal{I}$ ' representa a parte imaginária. . . . .	14
2.8	Função densidade de probabilidade Rayleigh . . . . .	16
2.9	Soma fasorial, representada pelos vetores azuis, onde a 'nuvem azul' indica uma grande numero de componentes aleatória gaussiana circular, ja o vetor vermelho é o vetor contante, $A_0$ , inteiramente no eixo real e o vetor resultando é representado pelo vetor vermelho escuro. . . . .	17
2.10	Função de densidade Rician para vários valores de $A_0/\sigma$ . . . . .	19
2.11	A função de densidade exponencial negativa. . . . .	22
3.1	Rede de Bravais (a) bidimensional e (b) tridimensional. . . . .	25
3.2	Ilustração do padrão típico de um potencial cristalino. . . . .	26
3.3	Densidade de estados para um rede cristalina com $N = 1000$ . . . . .	28
3.4	Evolução temporal da função de onda em uma rede com $N = 800$ . . . . .	29
3.5	Ilustração de uma rede com desordem: (a) representa o caso sem desordem, (b) apresenta desordem composicional e (c) mostra a desordem estrutural. . . . .	30

---

3.6	Densidade de estados para uma cadeia desordenada no modelo de Anderson, considerando a aproximação de primeiros vizinhos, para diversos valores de largura de desordem $W$ . Para uma rede com $N = 1000$ e 200 amostras. . . . .	31
3.7	(a) Evolução temporal da função de onda em uma rede desordenada, $W = 2$ , com $N = 800$ (b) perfil exponencialmente localizado da função de onda, alinha tracejada representa $e^{- n-\langle n \rangle /l}$ com $\langle n \rangle \approx 400$ e $l \approx 14$ . . . . .	32
3.8	Representação gráfica da densidade de estados para o modelo de elétrons não interagentes para um sistema (a) isolante e (b) condutor. (c) Densidade de estados para o modelo de elétrons fracamente interagentes. . . . .	34
3.9	Ilustração do <i>isolante de Mott</i> . Constituída de uma rede quadrada, onde as bolinhas amarelas representam os átomos, espaçados igualmente os pontos vermelhos representam os na rede. . . . .	34
4.1	Colisão entre duas partículas idênticas no referencial do centro de massa: representação esquemática da densidade de probabilidade das duas partículas. (a) Antes da colisão, os dois pacotes de ondas, $P1$ e $P2$ , estão claramente separados e podem ser rotulados. Quando se movem para colidir na origem, os dois pacotes de ondas se sobrepõem, representado pela nuvem verde. Após a colisão, a densidade de probabilidade torna-se diferente de zero em uma região com formato de casca esférica, cujo raio aumenta com o tempo. Devido à identidade das duas partículas, torna-se impossível determinar a qual pacote de ondas ( $P1$ ou $P2$ ) uma partícula detectada estava associada antes da colisão. (b) Representação esquemática de dois tipos de "caminhos" que o sistema poderia ter seguido ao passar do estado inicial para o estado encontrado na medição, uma vez que na região da colisão (nuvem verde) como os dois pacotes são idênticas, não podemos determinar o caminho que foi efetivamente seguido por cada uma. . . . .	38
4.2	Densidade de estados para $U = 0, 2, 6$ e $N = 115$ de duas partículas interagentes em uma rede (a-d) cristalina e (d-f) desordenada. . . . .	46
4.3	Extensão espacial para o sistema de duas partículas em uma a) rede cristalina e b) desordenada com $N = 500$ para vários valores de interação até um tempo $t = 700$ e $\Delta t = 0.01$ . . . . .	47

---

---

4.4	A média da extensão espacial em função dos valores de interação entre as partículas para $W = 1$ e $2$ com 20 amostras. Para calcular $\xi_{med}$ , analisamos o comportamento da extensão espacial ao longo do tempo, especificamente quando a extensão espacial satura. O procedimento é executado da seguinte maneira: considerando, por exemplo, 20 amostras para um valor específico de desordem e interação, na primeira amostra, somamos todos os valores da extensão espacial para cada ponto dentro do intervalo de tempo estabelecido. Em seguida, realizamos a divisão pela quantidade de pontos nesse intervalo de tempo. Este procedimento é repetido para todas as amostras, resultando em 20 valores. Finalmente, calculamos a média desses 20 valores correspondentes a cada amostra, obtendo, assim, nossa $\xi_{med}$ para um dado conjunto de $U$ e $W$ . Este processo é repetido para cada valor de interação. . . . .	48
4.5	Estrutura gráfica hamiltoniana de duas partículas. (a) O espaço de estados de duas partículas distinguíveis em 1D pode ser mapeado em uma matriz 2D. A diagonal com círculos pretos representa os estados de dupla ocupação. (b) A mudança de base $ \psi(m, n)\rangle_S$ e $ \psi(m, n)\rangle_A$ desacopla o hamiltoniano em duas partes, onde uma delas representa um sistema de bósons idênticos (círculos vermelhos) e a outra representa férmions sem spin (círculos azuis). O acoplamento entre os estados ligados bosônicos e os outros círculos na diagonal secundária é renormalizado por $\sqrt{2}$ (arestas grossas). . . . .	50
4.6	Uma matriz de guias de onda 2D, as setas azuis representa os feixe de luz clássica coerente. . . . .	54
5.1	Ilustração de uma rede 1d, onde iniciamos a função de onda em um sitio $p$ e medimos a amplitude de transição em um sitio $m$ . . . . .	57
5.2	Padrão de speckle para três valores de $\overline{\Delta t}$ diferentes, para uma rede cristalina usando. . . . .	58
5.3	Ilustração da distribuição gaussiana circulas. . . . .	59
5.4	Autoenergia em relação ao sítios da rede para uma rede com $N = 50$ e sem desordem. . . . .	60
5.5	Amplitude de transição em diferentes sítios para uma rede com $N = 100$ e sem desordem. . . . .	60
5.6	Ilustração da distribuição semi-normal. . . . .	61
5.7	Distribuição de speckle para uma rede <i>a)</i> cristalina e <i>b)</i> fracamente desordenada ( $W = 0.01$ ), em ambos os casos iniciamos a o pacote da função de onda no sitio 50 e medimos no sitio 53, considerando uma rede com $N = 100$ , realizando a evolução até o tempo $10^5 J^{-1}$ . Curva solida representa a distribuição exponencial [eq. 5.3] e a curva tracejada a discritbuição chi-quadrada [eq. 5.4]. . . . .	62

---

- 
- 5.8 Funções de densidade de probabilidade escalonadas de intensidades de duas partículas para uma única amostra desordenada com o tamanho da rede  $N = 40$  sítios e  $W = 0,01J$ . As estatísticas são feitas usando a relação de recorrência apresentada no capítulo 4 para o sistema de duas partículas, onde resolvemos de forma recursiva essa relação de recorrência usando a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal, da mesma forma descrita no caso de uma única partícula, onde usamos  $\overline{\Delta t} = 0.01$ . Nesse caso, as partículas não interagem ( $U = 0$ ), preparamos as duas partículas no sítio  $(m, n) = (20, 22)$  e a intensidade  $I = |h_{m,n}^{p,q}|^2$  é medida nos sítios  $(p, q) = (23, 26)$ . Para o caso distinguível, é mostrado pelas diamantes verdes, sendo a curva sólida verde a função distribuição  $\mathcal{K}$  com parâmetro  $\nu = 1$  e contraste  $\mathcal{C} = \sqrt{3}$ . Os triângulos cinza representam a transição entre a banda de estados ligados,  $I = |h_{m,m}^{p,p}|^2$ , com  $m = 20$  e  $p = 22$ . A curva sólida preta representa a distribuição Weibull ( $\mathcal{C} = \sqrt{5}$ ). Para referência, a distribuição exponencial é mostrada pela curva tracejada. . . . . 65
- 5.9 Sob as mesmas condições da figura anterior (figura 5.8). Quando ambas as partículas são bósons ou férmions idênticos com simetria adequada, temos  $I = |h_{m,n(B)}^{pq}|^2$  e  $I = |h_{m,n(F)}^{pq}|^2$ , respectivamente (quadrados vermelhos e círculos azuis). Para ambos os casos, obtemos outra distribuição  $\mathcal{K}$  com parâmetro de forma  $\nu = 2$  como consequência do emaranhamento devido à simetrização da função de onda. . . . . 66
- 5.10 Sob as mesma condições das figuras anteriores (figura 5.8 e 5.9), porem estamos considerando  $U = 1J$ , onde vemos que a distribuição referente aos férmions idênticos não sobre influencia da interação, enquanto que os bósons se ajustam a distribuição exponencial. . . . . 67
- 5.11 Contraste do speckle bosônico  $\mathcal{C}$  contra em função da interação  $U$  numa rede com  $N = 26$  sítios e  $W = 0,01J$ . Para uma dada desordem, a estatística para  $I = |h_{m,n(B)}^{p,q}|^2$  é considerada em três regimes de tempo diferentes, curto ( $tJ \in [0, \Delta]$ ; *quadrados*), intermediário ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *circulos*), e longo ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *tringulos*), com  $\Delta = 10^5$ , e  $\overline{\Delta} = 0.01$ . As curvas de contraste são médias de 100 realizações independentes de desordem. Os dois bósons são carregados nos sítios (10, 11), com as medidas de intensidade sendo feitas em (13, 16). . . . . 69
- 5.12 Sob as mesma condições das figuras anteriores (figura 5.8 e 5.9), porem estamos considerando  $U = 1J$ , onde vemos que tanto o caso de partículas distinguíveis quanto o de estados ligados se aproximam da distribuição exponencial. A partículas distinguíveis (diamantes verdes) apresenta uma cauda alargada. Quando apenas os estados ligados (triângulos cinzentos) estão envolvidos, a cauda retrai-se. . . . . 70
-

- 
- 5.13 Contraste do speckle bosônico  $\mathcal{C}$  contra em função da interação  $U$  numa rede com  $N = 26$  sítios e  $W = 0,01J$ . Para uma dada desordem, a estatística para  $I = |h_{m,n(B)}^{p,q}|^2$  é considerada em três regimes de tempo diferentes, curto ( $tJ \in [0, \Delta]$ ; *quadrados*), intermediário ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *circulos*), e longo ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *tringulos*), com  $\Delta = 10^5$ , e  $\bar{\Delta} = 0.01$ . As curvas de contraste são médias de 100 realizações independentes de desordem. Caso referente aos estados ligados, com os dois bósons colocados em (10,10) e medidos em (11,11). . . . . 71
- 5.14 Funções de densidade de probabilidade escalonadas associadas a transições bosônicas de estado ligado. Aqui,  $I = |h_{m,n}^{p,q}|$  com  $m = 20$  e  $p = 22$  considerando uma cadeia com  $N = 40$  sítios no regime U forte. As estatísticas são obtidas em uma única amostra de desordem com  $W = 0,01J$  evoluindo até o tempo  $tJ = 10^7$  em passos de 100. Triângulos acima (à direita) representam o caso para  $U = 200J$  ( $U = 500J$ ). Curvas sólidas são os ajustes Ricianos compostos obtidos isolando as quatro maiores amplitudes da soma fasorial aleatória correspondente para construir  $g(r)$ . A distribuição exponencial é exibida como uma curva tracejada para referência. . . . . 72

# Sumário

Folha de Rosto . . . . .	i
Ficha Catalográfica . . . . .	ii
Parecer da Banca Examinadora . . . . .	iii
Dedicatória . . . . .	iv
Agradecimento . . . . .	v
Epígrafe . . . . .	vi
Resumo . . . . .	vii
Abstract . . . . .	viii
Lista de Figuras . . . . .	ix
Sumário . . . . .	xiv
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Fenômenos de Speckles para uma luz coerente</b>	<b>4</b>
2.1 Origem e Observações de Speckles . . . . .	4
2.2 Speckles como uma caminhada aleatória em 2D . . . . .	8
2.2.1 Estatística da soma fasorial . . . . .	11
2.2.2 Soma Fasorial . . . . .	12
2.2.3 Soma de fasores com um fasor constante . . . . .	16
2.3 Estatísticas de primeira ordem . . . . .	21
<b>3 Estruturas cristalinas e desordenadas e o modelo de duas partículas</b>	<b>24</b>
3.1 Sistemas de rede Cristalina . . . . .	24
3.2 Modelo de Bloch . . . . .	25
3.3 Modelo de Anderson . . . . .	30
3.4 Modelo de Mott e Hubbard . . . . .	33
3.5 Modelo de Dois Elétrons interagentes . . . . .	35
<b>4 Sistemas de Duas partículas</b>	<b>37</b>
4.1 Sistema de partículas idênticas . . . . .	37
4.1.1 Operador de Permutação . . . . .	39
4.2 Postulado da Simetrização . . . . .	42

---

4.3	Duas partículas em uma rede cristalina . . . . .	43
4.3.1	Partículas distinguíveis . . . . .	44
4.3.2	Partículas indistinguíveis . . . . .	49
<b>5</b>	<b>Speckle de duas partículas</b>	<b>56</b>
5.1	Formalismo de speckle da dinâmica quântica de uma partícula . . . . .	56
5.2	Partículas não interagentes . . . . .	63
5.3	Partículas interagentes . . . . .	67
5.4	Banda de estados ligados e estatística sub-Rayleigh . . . . .	70
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>73</b>
	<b>Referências</b>	<b>82</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>83</b>
<b>A</b>	<b>Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Bloch</b>	<b>83</b>
<b>B</b>	<b>Demonstração da relação de recorrência para partículas distinguíveis para o caso estático</b>	<b>86</b>
<b>C</b>	<b>Demonstração da relação de recorrência para o caso simétrico e antisimétrico</b>	<b>90</b>

# Capítulo 1

## Introdução

A localização de Anderson é um fenômeno fundamental em física da matéria condensada, desempenhando um papel crucial na compreensão da propagação e interferência de ondas em sistemas desordenados [1]. Embora inicialmente estudado em sistemas de partículas quânticas não interagentes, a adição da interação pode resultar em fenômenos complexos, como a localização de muitos corpos, que recentemente tem apresentado progresso significativo [2]. O crescimento exponencial da dimensionalidade em um sistema de multi-partículas interagentes torna a exploração desses efeitos muito desafiadora.

Apesar dessas dificuldades, sistemas que já envolvem duas partículas interagentes oferecem um terreno fértil para investigações mais detalhadas [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]. Estudos anteriores se concentraram em identificar as condições sob as quais a interação entre as partículas pode resultar em um aumento no comprimento de localização, em comparação com o caso onde não há interação. Tal interesse foi inicialmente despertado pela observação de que, em cadeias desordenadas, dois elétrons interagindo podem se propagar a distâncias muito maiores do que seria esperado com base no comprimento de localização de uma única partícula [12]. Desde então, uma série de pesquisas tem se aprofundado nesse mecanismo, especialmente em relação à presença de interações moderadas entre partículas [13, 14, 15, 16, 17].

Fenômenos de localização não se limitam apenas a sistemas desordenados; também é possível observá-los em cadeias quase periódicas, onde uma mistura ressonante de estados de duas partículas não interagentes desempenha um papel importante [18, 19]. Em sistemas com apenas duas partículas interagentes, a interação pode gerar novos estados que são mais propensos a se propagar por longas distâncias, resultando em um aumento no comprimento de localização quando comparado ao caso sem interação.

Em sistemas de duas partículas, as correlações quânticas se manifestam mesmo na ausência de interação entre elas [4, 5]. Essas correlações surgem da simetrização das funções de onda para acomodar as propriedades bosônicas ou fermiônicas das partículas [7]. Além disso, sistemas de duas partículas podem ser facilmente implementados em redes fotônicas, como uma rede quadrada de guias de onda, utilizando apenas fontes clássicas de luz [6, 7, 9, 11, 20].

A interação entre a interação e a desordem nesses sistemas é um aspecto complexo

[17], dependendo de diversos fatores, incluindo a propriedade que está sendo medida. Muitas caracterizações exigem o conhecimento de várias amplitudes de funções de onda simultaneamente, tal como a função participação [11, 19].

Os padrões de speckle resultam da interferência entre múltiplos componentes de onda [21], manifestando-se tipicamente como texturas granulares aleatórias, bem conhecidas em imagens e outros contextos. Embora possam indicar a presença de um simples ruído à primeira vista, tais padrões possuem características universais (distribuições de probabilidade). Por isso, speckles oferecem uma gama de aplicações práticas, incluindo imagens médicas [22], biossensores [23], caracterização de superfícies [24], metrologia óptica [25], e até mesmo a manipulação de átomos frios [26].

Conseqüentemente, tem havido um esforço considerável para desenvolver técnicas que permitam a personalização desses padrões de speckle [27, 28]. Além das aplicações práticas, o estudo dos padrões de speckle busca resolver questões mais fundamentais. O padrão de ruído pode fornecer informações valiosas sobre o sistema subjacente que, de outra forma, seriam difíceis de investigar [23, 24]. A geração sob medida de padrões de speckle encontra aplicações em diversas áreas [29].

Assim, o objetivo geral deste trabalho é investigar a dinâmica de duas partículas quânticas interagentes em uma cadeia fracamente desordenada, com foco na análise das estatísticas das amplitudes de transição. Esse enfoque permitirá caracterizar as sutilezas da interferência quântica espacial entre as partículas. Além disso, buscaremos compreender o comportamento dessa interação abordando-a sob uma perspectiva da ótica clássica. Portanto, para uma melhor compreensão do nosso modelo e resultados, organizamos a dissertação da seguinte forma:

No capítulo 2, abordamos a origem e algumas observações do fenômeno de speckles, explorando conceitos fundamentais para sua descrição. Inicialmente, discutimos a natureza de uma caminhada aleatória em duas dimensões e estabelecemos premissas essenciais para analisar as propriedades estatísticas da soma fatorial. Desse modo, derivamos duas distribuições que são importantes para a compreensão dos resultados apresentados. Por fim, examinamos a estatística de primeira ordem dos padrões de speckles.

O capítulo 3 será dedicado à análise dos modelos de Bloch e Anderson, assim como à investigação da interação entre partículas conforme apresentado inicialmente por Mott. Inicialmente, iremos apresentar o modelo de Bloch, reproduzindo numericamente e analiticamente alguns resultados importantes. Em seguida, examinaremos os resultados do modelo de Anderson, buscando uma compreensão do fenômeno da localização de Anderson. Posteriormente, abordaremos a interação entre as partículas, conforme proposto inicialmente por Mott.

No capítulo 4, nos dedicamos a uma descrição detalhada do modelo de duas partículas, onde apresentamos o formalismo a ser empregado para tratar as partículas como bósons, férmions e partículas distinguíveis. Em seguida, discutimos alguns resultados previamente estabelecidos na literatura, visando uma compreensão inicial do comportamento do sistema de duas partículas e a validação dos nossos códigos computacionais. Finalmente, apresentamos uma abordagem sob a perspectiva de guias de onda do nosso modelo, explorando o objetivo central do nosso trabalho.

No capítulo 5, introduzimos o formalismo de speckles na dinâmica quântica de uma

---

partícula e o aplicamos à dinâmica de duas partículas. A discussão dos resultados está dividida em três casos: i) cenário sem interação; ii) cenário com interação; iii) padrões de speckle na banda de estados ligados. No último capítulo, capítulo 6, apresentaremos as conclusões de nosso trabalho.

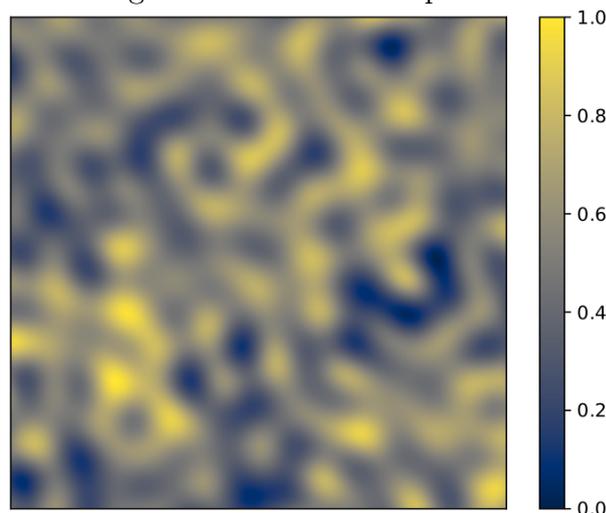
# Capítulo 2

## Fenômenos de Speckles para uma luz coerente

### 2.1 Origem e Observações de Speckles

O fenômeno de speckle remonta às observações iniciais de padrões granulares no século XIX. Em 1887, Exner descreveu a estrutura fibrosa observada quando a luz de uma lâmpada de mercúrio atravessava uma placa de vidro onde condensava vapor de sua respiração [30, 31]. Nas primeiras décadas do século XX, vários trabalhos teóricos foram produzidos abordando o tema [32, 33, 34]. No entanto, a compreensão aprofundada desse fenômeno e suas aplicações práticas começaram a surgir apenas na década de 1960, quando os lasers de ondas contínuas se tornaram comercialmente disponíveis [35, 36, 37].

Figura 2.1: Padrão de speckls.



Fonte : Autor, 2023.

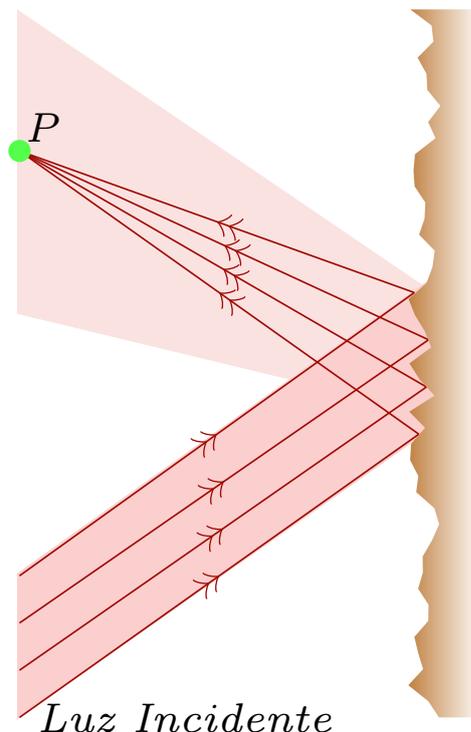
A essência do fenômeno é que, quando a luz coerente, como a de um laser, se propaga através de um meio que introduz variações aleatórias de fase e amplitude, ela cria um padrão granular de intensidade luminosa, com áreas brilhantes e escuras que se

alternam, como mostrado na Figura 2.1. Esse tipo de granularidade é o que chamamos de speckle.

A causa primária dessas flutuações, prontamente identificada, está relacionada às irregularidades nas superfícies onde a luz incide e é refletida, conforme documentado por [35, 38]. Para entender melhor esse fenômeno, é essencial considerar as características da superfície. Quando a textura da superfície possui dimensões que se aproximam da escala de comprimento de onda da onda incidente, ocorre a geração de padrões granulares, conhecidos como speckles. Essa resposta não se limita a um único tipo de onda, mas é observada em uma variedade delas, incluindo ondas ultrassônicas, micro-ondas, ondas de luz, raios X e até mesmo ondas de matéria [39, 40, 41, 21, 42, 43].

A configuração típica para observar o fenômeno de speckle, conforme ilustrado na Figura 2.2, descreve um cenário no qual a luz coerente incide sobre uma superfície com textura rugosa [44]. Nessa configuração, o fenômeno se desdobra da seguinte forma: a luz proveniente da fonte coerente atinge a superfície, onde ocorre a reflexão. O ponto de observação, representado por  $P$ , está situado de tal maneira que capta a luz refletida em várias direções pela superfície rugosa.

Figura 2.2: Processo de formação dos speckles ao analisarmos a luz refletida de uma superfície rugosa. Devido ao processo de reflexão da luz, observamos que a luz incidente se propaga em diversas direções (representadas pelo sombreado vermelho); entretanto, estamos particularmente interessados apenas naquelas que conseguimos observar no ponto de observação  $P$ .



Fonte : Autor, 2023.

O padrão de intensidade do speckle se origina do processo de interferência da luz que foi refletida em várias direções devido às irregularidades presentes na superfície.

Esse fenômeno se assemelha a uma série de pontos brilhantes e escuros intercalados, que se alternam na região observada. Os pontos escuros correspondem a áreas onde a interferência é altamente destrutiva, ou seja, as ondas de luz estão fora de fase e interferem de maneira a atenuar a intensidade luminosa. Em contrapartida, os pontos brilhantes representam áreas onde a interferência é altamente construtiva, indicando que as ondas de luz estão em fase e se somam para produzir uma maior intensidade luminosa nesse ponto, como mostrado na Figura 2.1.

Essa característica peculiar do speckle fornece informações valiosas sobre as propriedades da superfície e a natureza da luz incidente, tornando-o uma ferramenta útil em uma variedade de aplicações em óptica, ciência e tecnologia.

Alguns casos importantes incluem imagens de radar de abertura sintética (SAR) na região de micro-ondas do espectro eletromagnético. Nesse contexto, o speckle é observado nas imagens de alvos, como edifícios e paisagens urbanas, e pode fornecer informações valiosas sobre esses objetos. A Figura 2.3 apresenta uma imagem ilustrativa de um radar de abertura sintética que demonstra claramente a presença do speckle. Nessa imagem de Moffett Field, Califórnia, a granulação intensa do speckle é visível, e é possível distinguir com detalhes as pistas de pouso, edifícios industriais e até mesmo uma parte da Baía de São Francisco na parte inferior direita da imagem. Essa imagem foi adquirida utilizando um radar com um comprimento de onda de 5,67 cm e alcançou uma notável resolução no solo de cerca de 20 metros [45].

Figura 2.3: A imagem de radar de abertura sintética de Moffett Field, Califórnia, mostra granulação intensa.



Fonte : Retirada da referência [45].

Além disso, o fenômeno de speckle também desempenha um papel fundamental em imagens médicas de ultrassom de órgãos do corpo humano, sendo uma ferramenta valiosa para diagnóstico e visualização de estruturas internas. A Figura 2.4 exemplifica essa aplicação ao mostrar uma imagem ultrassonográfica do fígado humano na qual o

speckle é claramente visível [21].

Figura 2.4: Imagem de ultrassom (2,5 MHz) do fígado humano mostrando granulação.



Fonte : Retirada da referência [21].

Nesse contexto, o speckle proporciona informações únicas que são essenciais para os profissionais de saúde. As flutuações na intensidade do speckle refletem as características das estruturas do órgão em estudo, como a textura, densidade e elasticidade. Isso permite a detecção de anomalias, como tumores, cistos ou inflamações, com base na análise das variações do speckle. Além disso, a observação do speckle em imagens ultrassonográficas pode contribuir para o monitoramento de doenças crônicas e a avaliação da resposta ao tratamento.

Portanto, o fenômeno de speckle desempenha um papel vital tanto na área médica quanto em aplicações de radar de abertura sintética. O speckle fornece informações não invasivas e detalhadas sobre a condição dos órgãos e tecidos do corpo humano, destacando sua versatilidade e aplicabilidade em diagnóstico médico, pesquisa científica e tecnologia. Além disso, nas imagens de radar de abertura sintética, as variações na intensidade do speckle podem ser utilizadas para inferir informações sobre a rugosidade da superfície, o tamanho dos objetos e a qualidade da retroespalhamento das ondas de radar. Isso faz do fenômeno de speckle uma ferramenta essencial na análise de imagens de radar, especialmente em cenários nos quais é necessário obter informações detalhadas de alvos na Terra, como edifícios, veículos ou objetos naturais.

Agora, ao considerar o speckle tratado como um caminho aleatório, podemos explorar ainda mais a natureza estocástica<sup>1</sup> desse fenômeno e como ele se assemelha a um processo imprevisível que evolui ao longo do tempo e do espaço.

---

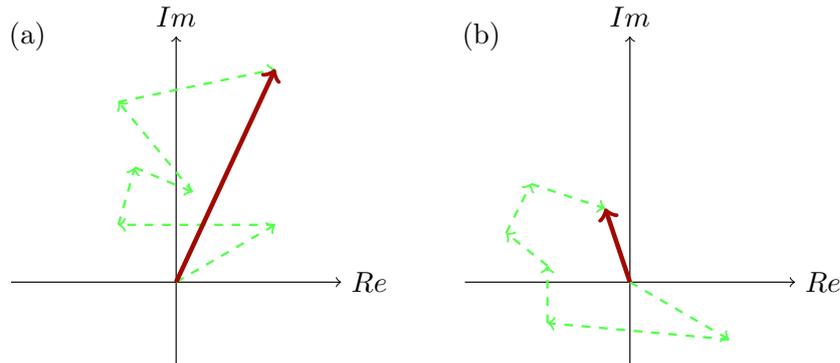
<sup>1</sup>Um fenômeno estocástico é caracterizado por um estado que não pode ser determinado com certeza, sendo influenciado por eventos aleatórios. Por exemplo, o lançamento de dados constitui um processo estocástico, uma vez que cada uma das seis faces do dado tem probabilidades iguais de ficar virada para cima após o arremesso. Em outras palavras, a natureza imprevisível e aleatória dos eventos contribui para a estocasticidade desse padrão.

## 2.2 Speckles como uma caminhada aleatória em 2D

Dado que os padrões de speckles resultam da interferência de várias componentes complexas da luz, cada uma com amplitude e fase aleatórias, é essencial abordar as propriedades estatísticas desse padrão.

O speckle, como explicado anteriormente, é formado por inúmeras componentes com comprimentos (amplitudes) e direções (fases) aleatórios. Quando essas componentes são somadas, resultam em uma caminhada aleatória. A magnitude dessa soma pode ser tanto grande quanto pequena, dependendo das fases relativas das componentes, isto é, se a interferência construtiva ou destrutiva prevalece. A Figura 2.5 ilustra a caminhada aleatória que gera (a) um fasor<sup>2</sup> resultante grande e (b) pequeno, ambos representados pela seta vermelha. Em ambos os casos, nenhuma contribuição domina a soma, pois tanto os comprimentos quanto as fases são aleatórios. Nesse cenário, o quadrado da magnitude do fasor resultado é a intensidade da onda observada, que é a quantidade mensurada.

Figura 2.5: Caminhadas aleatórias (a) soma construtiva e (b) soma destrutiva.



Fonte: Autor, 2023.

Para simplificar a modelagem estatística do speckle, assumimos que o campo incidente no ponto de observação P em  $(x, y)$  é perfeitamente polarizado e monocromático. Dessa forma, uma onda monocromática pode ser representada pelo seguinte sinal analítico<sup>3</sup> [46, 47]:

$$u(x, y; t) = A(x, y)e^{2i\pi\nu t}, \quad (2.1)$$

onde  $\nu$  é a frequência óptica e  $A(x, y)$  é a amplitude complexa do fasor, expressa como

$$A(x, y) = |A(x, y)|e^{i\theta(x, y)}. \quad (2.2)$$

<sup>2</sup>Um fasor é uma representação matemática complexa de uma onda senoidal, que descreve tanto a amplitude quanto a fase da onda. Essa representação é amplamente empregada na análise de circuitos elétricos, por exemplo, o módulo do fasor corresponde à intensidade da grandeza medida (tensão ou corrente), enquanto o ângulo, medido em relação à horizontal, indica a defasagem da corrente elétrica em relação à Tensão Elétrica em um componente específico.

<sup>3</sup>Um sinal analítico é uma representação matemática de uma onda que inclui informações sobre amplitude e fase em uma forma complexa, facilitando a análise matemática.

A intensidade  $I(x, y; t)$  de uma luz coerente é o quadrado da magnitude da equação 2.1, ou seja,

$$I(x, y; t) = |u(x, y; t)|^2. \quad (2.3)$$

Considere agora que o fenômeno de speckle é gerado por uma fonte de luz cujo comportamento é intrinsecamente aleatório. Em outras palavras, a função  $u(x, y; t)$  que descreve essa luz é, em si, uma função estocástica.

Dado esse comportamento aleatório, a intensidade em um ponto e tempo específicos também se torna uma variável aleatória. Para lidar com essa aleatoriedade, introduzimos a ideia de média de ensemble. Em termos simples, estamos tirando a média ao longo de muitas repetições dessa função aleatória, ou seja, ao observar o padrão de luz, como o speckle, em um ponto ao longo do tempo, a cada observação desse padrão realizamos uma medição em um instante particular. Cada medição representa uma realização única da função aleatória que descreve a luz nesse ponto e tempo, evidenciando a variabilidade do comportamento aleatório da luz nessa situação. A média de ensemble é simplesmente a média dessas diferentes realizações. Isso nos ajuda a obter uma visão mais estável e representativa do comportamento médio da luz coerente nesse ponto específico, considerando sua natureza aleatória. Podemos expressar esse processo da seguinte maneira:

$$I(x, y; t) = \langle |u(x, y; t)|^2 \rangle, \quad (2.4)$$

com  $\langle \cdot \rangle$  representando a média de ensemble.

Além disso, por simplicidade, consideramos que a luz é estacionária, o que significa que sua intensidade média não varia com o tempo. Isso cria um processo estatisticamente estacionário, como mostrado na Figura 2.6(a). Em contraste, um processo não estacionário teria uma intensidade média variável ao longo do tempo, como mostrado na Figura 2.6(b).

Outra forma que podemos escrever a intensidade é :

$$I(x, y) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} |u(x, y; t)|^2 dt = |A(x, y)|^2, \quad (2.5)$$

onde a média de  $A$  é determinada pela média do tempo para um período tendendo ao infinito ( $T \rightarrow \infty$ ), estamos considerando o que acontece à medida que o período. Nesse caso, estamos interessados na média da intensidade do campo  $u$  ao longo de um período de tempo muito grande.

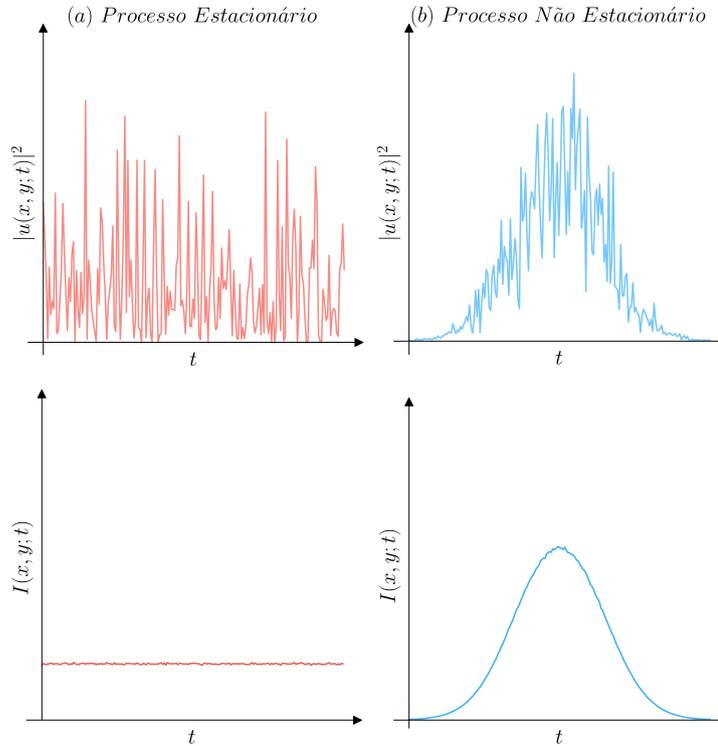
Essa abordagem difere da expressão anterior para a média da intensidade. Antes, consideramos a média de ensemble diretamente sobre muitas realizações da função aleatória, conforme a Equação 2.4. Agora, ao introduzir o limite e a média temporal, estamos analisando a média da intensidade durante um tempo extremamente longo em uma única repetição da função aleatória.

Assim, em ambos os cenários<sup>4</sup>, concluímos que a intensidade do padrão de spec-

---

<sup>4</sup>Para o primeiro caso, substituindo a expressão para  $u(x, y; t)$  na equação 2.4, ficamos com:

Figura 2.6: (a) Uma onda estatisticamente estacionária mantém uma intensidade média  $I(x, y; t)$  constante ao longo do tempo. (b) Em contraste, uma onda estatisticamente não estacionária possui uma intensidade média  $I(x, y; t)$  que varia conforme o tempo. Esses gráficos podem ilustrar, por exemplo, a intensidade da luz gerada por uma lâmpada incandescente alimentada por (a) uma corrente elétrica constante e (b) um pulso de corrente elétrica.



Fonte: Autor, 2023.

kle é consistentemente determinada pelo quadrado da magnitude da amplitude do fasor resultante.

Agora que compreendemos como expressar a intensidade do padrão de speckle, vamos abordar a representação do fasor resultante no plano complexo para essa intensidade. Até o momento, tratamos a caminhada aleatória no plano complexo de maneira subjetiva. Para simplificar, consideremos o instante  $t = 0$ , onde a amplitude do fasor resultante  $A$  é a soma ponderada de várias contribuições  $a_n(x, y)/\sqrt{N}$ , onde  $n = 1, 2, 3, \dots, N$ .

$$I(x, y; t) = \langle |u(x, y; t)|^2 \rangle = \langle |A(x, y)e^{2i\pi\nu t}|^2 \rangle.$$

Agora, expandimos a expressão usando a propriedade dos módulos ao quadrado:

$$\langle |A(x, y)|^2 |e^{2i\pi\nu t}|^2 \rangle.$$

Simplificamos a expressão, observando que  $|e^{2i\pi\nu t}|^2 = 1$ :

$$I(x, y; t) = \langle |A(x, y)|^2 \rangle.$$

$$\mathbf{A}(x, y) = Ae^{i\theta} = \sum_{n=1}^N \frac{a_n(x, y)}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n e^{j\phi_n}. \quad (2.6)$$

Aqui,  $N$  representa o número de componentes fasoriais na caminhada aleatória,  $A$  é o comprimento do fasor resultante,  $\theta$  é a fase resultante, e  $a_n$  é a  $n$ -ésima componente fasorial, um número complexo. Introduzimos o fator de escala  $1/\sqrt{N}$  para preservar o segundo momento [21].

### 2.2.1 Estatística da soma fasorial

Antes de explorarmos as propriedades estatísticas da amplitude da onda, é necessário estabelecer algumas premissas relacionadas às estatísticas das componentes da soma fasorial, conforme expresso na equação 2.6. Essas premissas podem ser mais compreensíveis ao considerarmos as partes reais e imaginárias do fasor resultante.

Considere a equação:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos\phi_n + j \operatorname{sen}\phi_n \quad (2.7)$$

onde consideraremos as partes reais e imaginárias :

$$\begin{cases} \mathcal{R} = \operatorname{Re}\{\mathbf{A}\} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos\phi_n \\ \mathcal{I} = \operatorname{Im}\{\mathbf{A}\} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \operatorname{sen}\phi_n \end{cases} \quad (2.8)$$

Dessa forma, assumiremos as seguintes premissas :

1. A amplitude e fase  $a_n$  e  $\phi_n$  são estatisticamente independentes de  $a_m$  e  $\phi_m$ , desde que  $m \neq n$ . Isto é, o conhecimento dos valores da amplitude ou/e da fase de um dos fasores não implica ter conhecimento da amplitude e da fase de qualquer outro fasor;
2. Para qualquer  $n$ ,  $a_n$  e  $\phi_n$  são estatisticamente independentes entre si. Isto é, o conhecimento da fase de uma componente fasorial não implica no conhecimento dos valores de amplitude do mesmo fasor, e vice-versa;
3. A fase  $\phi_m$  é uniformemente distribuída no intervalo  $(0, 2\pi)$ . Isto é, todos os valores de fases são igualmente prováveis.

Essas suposições são particularmente relevantes e frequentemente atendidas em contextos que envolvem problemas de passeio aleatório, nos quais as características estatísticas das amplitudes e fases das ondas são essenciais para a modelagem precisa do fenômeno em questão.

### 2.2.2 Soma Fasorial

Vamos analisar as implicações dessas três premissas na parte real e imaginária do fasor resultante, utilizando o primeiro e segundo momentos. O primeiro momento é a média, enquanto o segundo momento está relacionado à variabilidade em torno da média [48].

Iniciando com o primeiro momento, temos:

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos \phi_n \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \langle a_n \cos \phi_n \rangle. \quad (2.9)$$

Considerando a independência estatística de  $a_n$  e  $\phi_n$ , conforme nossas premissas, obtemos:

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos \phi_n \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \langle a_n \rangle \langle \cos \phi_n \rangle = 0, \quad (2.10)$$

uma vez que  $\cos \phi_n$  é uniformemente distribuído em  $(0, 2\pi)^5$ .

De forma análoga para a parte imaginária, temos:

$$\langle \mathcal{I} \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \sin \phi_n \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \langle a_n \rangle \langle \sin \phi_n \rangle = 0. \quad (2.12)$$

Ao aplicarmos o mesmo raciocínio para o segundo momento, obtemos:

$$\langle \mathcal{R}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle a_n a_m \rangle \langle \cos \phi_n \phi_m \rangle, \quad (2.13)$$

onde observamos que:

- Se  $m \neq n$ :  $\langle \cos \phi_n \cos \phi_m \rangle = \langle \cos \phi_n \rangle \langle \cos \phi_m \rangle = 0$
- Se  $m = n$ :  $\langle \cos \phi_n \cos \phi_m \rangle = \langle \cos \phi_n \cos \phi_n \rangle = \langle \cos^2 \phi_n \rangle = \left\langle \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos 2\phi_n \right\rangle = \frac{1}{2}$

Portanto, considerando apenas os termos não nulos, temos:

$$\langle \mathcal{R}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \langle a_n^2 \rangle \langle \cos^2 \phi_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\langle a_n^2 \rangle}{2}, \quad (2.14)$$

<sup>5</sup>Podemos escrever a media, também como :

$$\langle \cos \phi_n \rangle = \int_0^{2\pi} \cos \phi_n d\phi_n = 0. \quad (2.11)$$

e de forma análoga para a parte imaginária:

$$\langle \mathcal{I}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \langle a_n^2 \rangle \langle \sin^2 \phi_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\langle a_n^2 \rangle}{2}. \quad (2.15)$$

Usando a definição de variância:

$$\sigma^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \quad (2.16)$$

podemos observar que a variância das partes reais e imaginárias são iguais para o segundo momento, uma vez que  $\phi_n$  é uniformemente distribuído em  $(0, 2\pi)$ . Assim,

$$\sigma^2 = \langle \mathcal{R}^2 \rangle = \langle \mathcal{I}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\langle a_n^2 \rangle}{N}. \quad (2.17)$$

Realizaremos agora o cálculo da função correlação entre as partes real e imaginária, ou seja,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathcal{R}, \mathcal{I}} = \langle \mathcal{R}\mathcal{I} \rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos \phi_n \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \sin \phi_n \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \langle a_n a_n \rangle \langle \cos \phi_n \sin \phi_n \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \langle a_n^2 \rangle \left\langle \frac{\sin 2\phi_n}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\langle a_n^2 \rangle}{2} \langle \sin 2\phi_n \rangle = 0 \end{aligned}$$

onde  $\langle \sin 2\phi_n \rangle = 0$ . Concluimos, portanto, que não há correlação entre as partes  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{I}$  do fasor resultante sob as condições impostas.

Agora, ao considerarmos  $N$  muito grande, as partes real e imaginária do fasor resultante,  $\mathbf{A}$ , serão constituídas por uma soma significativa de variáveis independentes ( $a_n$  e  $\phi_n$ ). Nessa perspectiva, recorreremos ao Teorema do Limite Central [49], que estabelece que a distribuição da soma de um grande número de variáveis independentes, independentemente da forma original de suas distribuições, tenderá a se aproximar de uma distribuição normal. Dessa forma, à medida que  $N \rightarrow \infty$ , as partes real e imaginária se aproximarão assintoticamente de uma distribuição normal.

Dessa maneira, expressamos as partes real ( $\mathcal{R}$ ) e imaginária ( $\mathcal{I}$ ) por meio de funções de densidade de probabilidade normais:

$$f(\mathcal{R}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{R}}{\sigma}\right)^2\right) \quad (2.18)$$

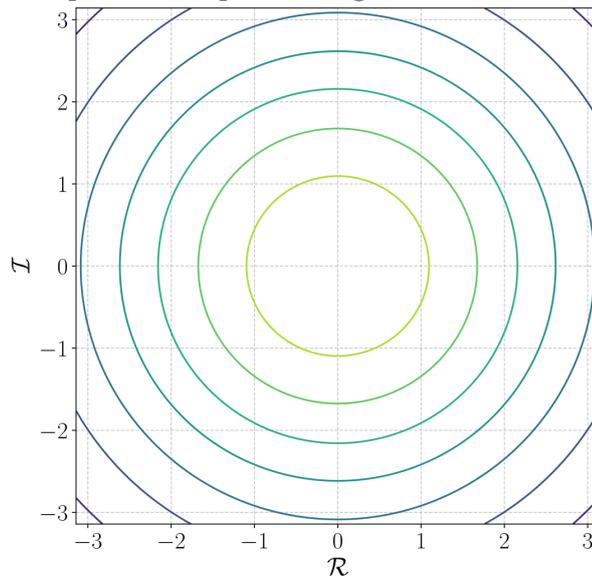
$$f(\mathcal{I}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{I}}{\sigma}\right)^2\right) \quad (2.19)$$

Conforme estabelecido anteriormente, os valores esperados de  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{I}$  são nulos, e para simplificar, adotaremos  $\sigma \equiv \sigma_{\mathcal{R}} = \sigma_{\mathcal{I}}$ . Além disso, dado que  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{I}$  são não correlacionados, podemos formular a função de densidade de probabilidade conjunta como o produto das funções individuais.

$$p_{\mathcal{R},\mathcal{I}}(\mathcal{R},\mathcal{I}) = f(\mathcal{R}) \cdot f(\mathcal{I}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{R}^2 + \mathcal{I}^2}{2\sigma^2}\right)\right\}. \quad (2.20)$$

Esse resultado reflete a independência estatística entre  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{I}$ . A densidade de probabilidade conjunta no plano  $\mathcal{R} \times \mathcal{I}$  delinea círculos centrados na origem, conforme ilustrado na Figura 2.7. As regiões com curvas mais escuras (roxas e azuis) indicam uma menor densidade de probabilidade, refletindo áreas onde os eventos têm uma probabilidade mais elevada de ocorrer. Em contrapartida, as áreas com curvas mais claras (verdes e amarelas) representam regiões de maior densidade de probabilidade, onde os eventos têm uma probabilidade reduzida. A representação gráfica dessa distribuição revela a natureza circular do contorno, caracterizando o fasor complexo,  $\mathbf{A}$ , como uma variável gaussiana complexa circular.

Figura 2.7: Gráfico de contorno representando a densidade de probabilidade constante para uma variável aleatória gaussiana complexa circular. O eixo ' $\mathcal{R}$ ' representa a parte real, enquanto o eixo ' $\mathcal{I}$ ' representa a parte imaginária.



Fonte: Autor, 2023.

Devido à natureza circular desse contorno, o fasor complexo,  $\mathbf{A}$ , é caracterizado como uma variável gaussiana complexa circular. Podemos estender essa discussão para as grandezas de amplitude e fase,  $A$  e  $\theta$ , respectivamente, usando as regras da teoria da probabilidade para transformações de variáveis [21]. Inicialmente, expressamos  $A$  e  $\theta$  em termos de  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{I}$ , onde para  $A$  multiplicamos pela sua complexa conjugada, resultando em:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{A}^* = |\mathbf{A}|^2 = A^2 &= \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos \phi_n \right)^2 + \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \sin \phi_n \right)^2, \\ \Rightarrow A &= \sqrt{\mathcal{R}^2 + \mathcal{I}^2} \end{aligned} \quad (2.21)$$

e para  $\theta$  faremos:

$$\theta = \arctan \left\{ \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{R}} \right\}. \quad (2.22)$$

Considerando  $\mathcal{R} = A \cos \theta$  e  $\mathcal{I} = A \sin \theta$ , escrevemos a densidade de probabilidade conjunta  $A$  e  $\theta$  após a transformação de variáveis como:

$$p_{A,\theta}(A, \theta) = p_{\mathcal{R},\mathcal{I}}(A \cos \theta, A \sin \theta) |J|, \quad (2.23)$$

onde  $J$  é a matriz jacobiana, dada por:

$$|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial A} & \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \theta} \\ \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial A} & \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \theta} \end{vmatrix} = A, \quad (2.24)$$

portanto,

$$p_{A,\theta}(A, \theta) = \frac{A}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{A^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (2.25)$$

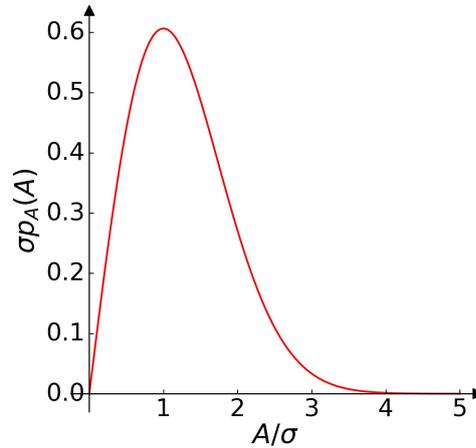
com  $A \geq 0$  e  $0 \leq \theta < 2\pi$ . Obtida a estatística conjunta de  $A$  e  $\theta$ , descreveremos agora as estatísticas isoladas de  $A$  e  $\theta$ . Para  $A$ , a função densidade de probabilidade *Rayleigh* é dada por:

$$p_A = \int_0^{2\pi} p_{A,\theta}(A, \theta) d\theta = \frac{A}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{A^2}{2\sigma^2} \right\} \int_0^{2\pi} d\theta = \frac{A}{\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{A^2}{2\sigma^2} \right\}. \quad (2.26)$$

Essa expressão é conhecida como a função densidade de probabilidade *Rayleigh*, e na Figura 2.8 podemos observar sua representação gráfica, evidenciando que a amplitude do fasor resultante segue uma distribuição *Rayleigh*.

Na figura 2.8, podemos observar que a distribuição *Rayleigh* tem uma forma assimétrica e não negativa, com a probabilidade concentrada em valores mais baixos de

Figura 2.8: Função densidade de probabilidade Rayleigh



Fonte: Autor, 2023.

amplitude e diminuindo à medida que a amplitude aumenta. As curvas mais elevadas indicam regiões de maior probabilidade, enquanto as curvas mais baixas correspondem a regiões menos prováveis. Isso sugere que, no contexto do fador resultante, amplitudes menores são mais prováveis de ocorrer.

Essa distribuição é comumente encontrada em sistemas nos quais a amplitude é influenciada por múltiplos processos independentes e aleatórios. Além disso, ao considerarmos a distribuição de probabilidade para a fase, representada por  $p_\theta(\theta)$ , podemos calcular sua expressão como:

$$p_\theta(\theta) = \int_0^\infty \frac{A}{2\pi} \exp\left\{-\frac{A}{2\sigma^2}\right\} dA = \frac{1}{2\pi}. \quad (2.27)$$

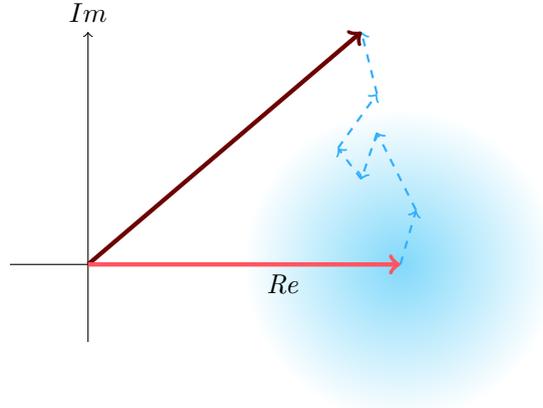
Este resultado indica que a probabilidade de observar qualquer valor específico da fase  $\theta$  constante e independe da amplitude  $A$ . A partir desse resultado, percebemos que a função densidade conjunta de  $A$  e  $\theta$  pode ser fatorada como um produto das distribuições  $p_A(A)$  e  $p_\theta(\theta)$ . Essa fatorização revela que  $A$  e  $\theta$  são variáveis aleatórias estatisticamente independentes. Em outras palavras, o conhecimento da amplitude não fornece informações adicionais sobre a distribuição da fase, e vice-versa.

### 2.2.3 Soma de fadores com um fador constante

Além do cenário da distribuição *Rayleigh* discutido anteriormente, outra situação relevante ocorre quando o fador resultante é modelado como a soma de um fador variável e um fador constante, conforme ilustrado na Figura 2.9. Essa configuração ampliada é particularmente útil para compreender fenômenos onde a contribuição constante é significativa.

Nesse contexto, para simplificar sem perder generalidade, consideramos que o fador constante está alinhado completamente ao longo do eixo real. Dessa forma, as partes real e imaginária do fador resultante são expressas como:

Figura 2.9: Soma fasorial, representada pelos vetores azuis, onde a 'nuvem azul' indica uma grande numero de componentes aleatória gaussiana circular, ja o vetor vermelho é o vetor contante,  $A_0$ , inteiramente no eixo real e o vetor resultando é representado pelo vetor vermelho escuro.



Fonte: Autor, 2023.

$$\mathcal{R} = A_0 + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \cos \phi_n \quad (2.28)$$

$$\mathcal{I} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n \sin \phi_n, \quad (2.29)$$

onde  $A_0$  representa o fasor constante conhecido. Essa modelagem oferece uma perspectiva mais abrangente, permitindo a análise de fenômenos que envolvem tanto componentes variáveis quanto constantes no fasor resultante.

A introdução do fasor constante adiciona uma média conhecida à parte real do fasor resultante [21], podemos ilustra isso da seguinte forma: Imagine que estamos acompanhando a trajetória de um objeto em movimento ao longo do tempo. O fasor constante seria como se tivéssemos uma ideia clara de onde o objeto geralmente se encontra, independentemente do tempo. Isso se torna uma espécie de "ponto de referência" ou "média conhecida". Então, o que estamos fazendo é considerar não apenas as variações aleatórias do objeto, mas também adicionando essa "média" constante à equação. Da mesma forma como feito anteriormente, consideramos  $N \rightarrow \infty$ , ou seja, um grande número de passos na soma fasorial. Isso faz com que as partes real e imaginária se aproximem assintoticamente de uma distribuição gaussiana, resultando em:

$$p_{\mathcal{R}, \mathcal{I}}(\mathcal{R}, \mathcal{I}) = \frac{1}{2\pi\sigma} \exp \left\{ -\frac{(\mathcal{R} + A_0)^2 + \mathcal{I}^2}{2\sigma^2} \right\}. \quad (2.30)$$

Usando a mesma transformação mencionada anteriormente, obtemos:

$$\begin{aligned}
p_{A,\theta}(A, \theta) &= p_{\mathcal{R},\mathcal{I}}(\mathcal{R} = A\cos\theta, \mathcal{I} = A\sin\theta) |J| \\
&= \frac{A}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{(A\cos\theta - A_0)^2 + (A\sin\theta)^2}{2\sigma^2} \right\} \\
&= \frac{A}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{(A\cos\theta)^2 + (A\sin\theta)^2 - 2AA_0\cos\theta + A_0^2}{2\pi\sigma^2} \right\} \\
&= \frac{A}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{A^2 - 2AA_0\cos\theta + A_0^2}{2\pi\sigma^2} \right\}
\end{aligned}$$

da mesma forma  $A \geq 0$  e  $\theta \in [0, 2\pi[$ . Assim para calcular a estatística marginal de  $A$  e  $\mathbf{A}$ , procedemos da mesma forma que nos casos anteriores. Logo:

$$\begin{aligned}
p_A(A) &= \int_0^{2\pi} p_{A,\theta}(A, \theta) d\theta = \frac{A}{2\pi\sigma^2} \int_0^{2\pi} \exp \left\{ -\frac{A^2 + 2AA_0\cos\theta + A_0^2}{2\sigma^2} \right\}, \\
&= \frac{A}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{A^2 + A_0^2}{2\sigma^2} \right\} \int_0^{2\pi} d\theta \exp \left\{ \frac{2AA_0\cos\theta}{2\sigma^2} \right\},
\end{aligned}$$

usando a inidentidade:

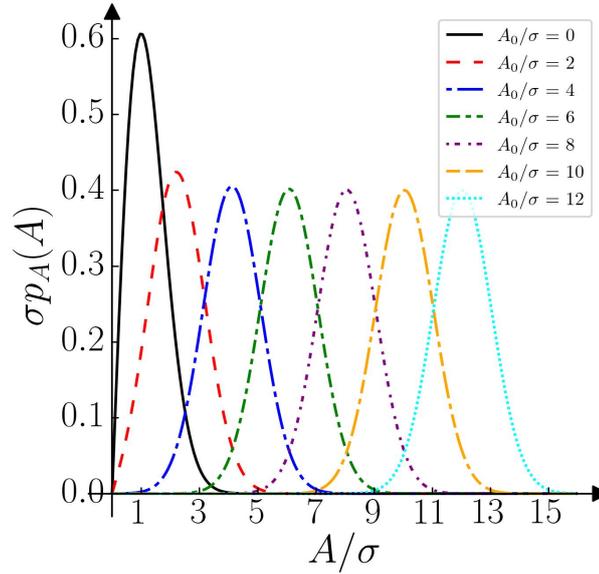
$$\int_0^{2\pi} e^{bcost} dt = 2\pi I_0(b), \quad (2.31)$$

onde  $I_0(\cdot)$  é a função de Bessel modificada do primeiro tipo. Assim, obtemos:

$$p_A(A) = \frac{A}{2\pi\sigma} \exp \left\{ -\frac{A^2 + A_0^2}{2\sigma^2} \right\} I_0 \left( \frac{AA_0}{\sigma^2} \right), \quad (2.32)$$

valido para  $A \geq 0$ . Agora, ao observarmos a representação gráfica dessa densidade na Figura 2.10 para diferentes valores da razão  $A_0/\sigma$  podemos extrair algumas informações relevantes. Quando  $A_0/\sigma = 0$ , a densidade de *Rician* assume exatamente a forma da densidade de Rayleigh. Isso significa que, na ausência do componente constante  $A_0$ , nossa distribuição se reduz à conhecida distribuição de Rayleigh, que é comumente usada para modelar situações onde não há contribuição constante no sinal. Já quando  $A_0/\sigma \neq 0$ , notamos uma mudança. A densidade de *Rician* assume uma forma simétrica, indicando que a presença do componente constante influencia a distribuição, tornando-a mais simétrica ao redor do seu valor médio. No limite que  $A_0/\sigma$  é muito grande, a densidade de *Rician* começa a se parecer cada vez mais com uma densidade gaussiana. Em outras palavras, quando a contribuição do componente constante é significativamente maior em comparação com a variabilidade do sinal, a distribuição se aproxima de uma distribuição normal, também conhecida como gaussiana.

Vamos explorar em detalhes o processo para a fase, seguindo a mesma linha de raciocínio. Ao realizar a integral para a função de densidade de probabilidade da fase  $p_\theta(\theta)$ , obtemos a seguinte expressão:

Figura 2.10: Função de densidade Rician para vários valores de  $A_0/\sigma$ .


Fonte: Autor, 2023.

$$p_\theta(\theta) = \int_0^\infty p_{A,\theta}(A, \theta) dA = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{A_0^2}{2\sigma^2}\right\} \int_0^\infty A \exp\left\{-\frac{A^2 - 2AA_0\cos\theta}{2\sigma^2}\right\} dA. \quad (2.33)$$

Resolvendo apenas a integral, temos:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty A \exp\left\{-\frac{A^2 - 2AA_0\cos\theta}{2\sigma^2}\right\} dA &= \int_0^\infty A \exp\left\{-\frac{A^2 - 2AA_0\cos\theta + A_0^2\cos^2\theta - A_0^2\cos^2\theta}{2\sigma^2}\right\} dA, \\ &= \exp\left\{\frac{A_0^2\cos^2\theta}{2\sigma^2}\right\} \int_0^\infty A \exp\left\{-\left(\frac{A - A_0\cos\theta}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} dA, \end{aligned}$$

 fazendo a seguinte mudança de variável,  $u = A - A_0\cos\theta \Rightarrow du = dA$ , então resolvendo apenas a integral, temos

$$\begin{aligned} \int_0^\infty A \exp\left\{-\left(\frac{A - A_0\cos\theta}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} dA &= \int_0^\infty (u + A_0\cos\theta) \exp\left\{-\left(\frac{u}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} du \\ &= \int_0^\infty u \exp\left\{-\left(\frac{u}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} du + \int_0^\infty A_0\cos\theta \exp\left\{-\left(\frac{u}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} du \\ &= \int_0^\infty u \exp\left\{-\left(\frac{u}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} du + A_0\cos\theta \int_0^\infty \exp\left\{-\left(\frac{u}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2\right\} du \quad (2.34) \end{aligned}$$

tendo em mente que:

$$\int_0^\infty x^{2n} \exp \left\{ - \left( \frac{x}{a} \right)^2 \right\} dx = \sqrt{\pi} \frac{(2n)!}{n!} \left( \frac{a}{2} \right)^{2n+1},$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} \exp \left\{ - \left( \frac{x}{a} \right)^2 \right\} dx = \frac{n!}{2} a^{2n+2},$$

com isso obtemos, onde para a segunda integral de 2.34, consideramos  $n = 0$  em ambas as integrais,

$$\int_0^\infty A \exp \left\{ - \left( \frac{A - A_0 \cos \theta}{\sqrt{2}\sigma} \right)^2 \right\} dA = \sigma^2 + A_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma \cos \theta. \quad (2.35)$$

Substituindo este resultado em  $p_\theta(\theta)$ , obtemos:

$$\begin{aligned} p_\theta(\theta) &= \frac{\exp(-A_0^2/2\sigma^2)}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ \frac{A_0^2 \cos^2 \theta}{2\sigma^2} \right\} \left( \sigma^2 + A_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma \cos \theta \right), \\ &= \frac{\exp(-A_0^2/2\sigma^2)}{2\pi} \exp \left\{ \frac{A_0^2 \cos^2 \theta}{2\sigma^2} \right\} \left( 1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{A_0}{\sigma} \cos \theta \right). \end{aligned}$$

essa solução é válida para  $\theta \in [0, 2\pi[$ . Inicialmente, ao considerar  $A_0/\sigma = 0$ , observamos que a fase é uniformemente distribuída, um comportamento já observado na distribuição de Rayleigh. Isso significa que, na ausência de um componente constante significativo, a fase do fasor resultante é igualmente provável em todas as direções. Entretanto, à medida que  $A_0/\sigma$  aumenta, a distribuição de fase torna-se mais concentrada ao redor do fasor constante, i.e,  $\theta \ll 1$ . Isso indica que a presença de um componente constante resulta em uma maior probabilidade de ocorrência de fases próximas àquela associada ao fasor constante. Em outras palavras, a fase do sinal tende a se agrupar em torno da fase do componente constante. Quando  $A_0/\sigma$  é muito grande, a distribuição de fase se aproxima de uma distribuição gaussiana. Essa transição para uma distribuição gaussiana implica que, em cenários onde o componente constante é significativamente maior em relação à variabilidade do sinal, a fase do fasor resultante segue uma distribuição gaussiana<sup>6</sup>:

$$p_\theta(\theta) \approx \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ - \frac{\theta^2}{2(\sigma/A_0)^2} \right\}.$$

<sup>6</sup>Diante de todas as aproximações, temos:

$$\begin{aligned} \bullet \quad & 1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{A_0}{\sigma} \cos \theta = 1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{A_0}{\sigma}, \text{ como } A_0/\sigma \gg 1 \\ & \approx \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{A_0}{\sigma} \\ \bullet \quad & \exp \left\{ \frac{A_0^2 \cos^2 \theta}{2\sigma^2} \right\} \approx \exp \left\{ \frac{A_0^2}{2\sigma^2} (1 - \theta^2) \right\} = \exp \left\{ \frac{A_0^2}{2\sigma^2} \right\} \exp \left\{ - \frac{A_0^2 \theta^2}{2\sigma^2} \right\} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Essa distribuição gaussiana possui média zero, o que significa que, em média, a fase do sinal não possui um desvio em relação ao componente constante. O desvio padrão dessa distribuição gaussiana é dado por  $\sigma/A_0$ , indicando a dispersão da fase em relação ao fasor constante.

## 2.3 Estatísticas de primeira ordem

Nesta seção, examinaremos as propriedades estatísticas de primeira ordem dos padrões de speckles. Por primeira ordem, estamos considerando as propriedades estatísticas em um único ponto no espaço. Vale destacar que a origem do speckle reside na adição de uma série de contribuições complexas em fase aleatória, geralmente amplitudes complexas. Assim, os resultados da soma fasorial aleatória das seções anteriores serão de grande ajuda para nós aqui. Assumindo que as condições estatísticas delineadas na seção 2.2.1 são válidas aqui para as componentes fasoriais.

Para isso, inicialmente, escreveremos a densidade de probabilidade em função da intensidade  $I$  do campo de speckles, dada pela equação 2.5. Considerando que a intensidade  $I$  é uma variável aleatória que se relaciona com a amplitude  $|A|$  através de uma transformação monótona de uma variável aleatória<sup>7</sup>, expressa por:

$$I = f(A) = A^2. \quad (2.37)$$

Assim, a função densidade de probabilidade  $p_I(I)$  pode ser derivada da função densidade de probabilidade  $p_A(A)$ , através da seguinte transformação:

$$p_I(I) = p_A(\sqrt{I}) \left| \frac{dA}{dI} \right| = \frac{1}{2\sqrt{I}} p_A(\sqrt{I}). \quad (2.38)$$

Este resultado nos permite especificar a função densidade de probabilidade da intensidade para cada caso em que conhecemos a densidade de probabilidade da amplitude  $A$ .

Quando lidamos com um grande número de contribuições de fasores aleatórios, a função densidade de probabilidade da amplitude segue uma distribuição *Rayleigh*, conforme descrita pela equação 2.26. Aplicando a transformação anteriormente, descobrimos que a intensidade do padrão de speckle é distribuída de acordo com a densidade de probabilidade exponencial negativa:

---

<sup>7</sup>Uma transformação monótona de uma variável aleatória é uma função que preserva a ordem dos valores dessa variável aleatória. Isso significa que se você tem duas observações  $X_1$  e  $X_2$  de uma variável aleatória  $X$ , e  $X_1 \leq X_2$ , então a transformação monótona aplicada a  $X_1$  será menor do que a transformação aplicada a  $X_2$ .

$$\begin{aligned}
 p_I(I) &= \frac{\sqrt{I}}{\sigma^2} \exp\left\{-\frac{I}{2\sigma^2}\right\} \frac{1}{2\sqrt{I}}, \\
 &= \frac{1}{2\sigma^2} \exp\left\{-\frac{I}{2\sigma^2}\right\},
 \end{aligned} \tag{2.39}$$

com  $I \geq 0$ , podemos reescrever essa expressão em termos do primeiro momento. Para isso, resolveremos a seguinte integral<sup>8</sup>. Obtemos:

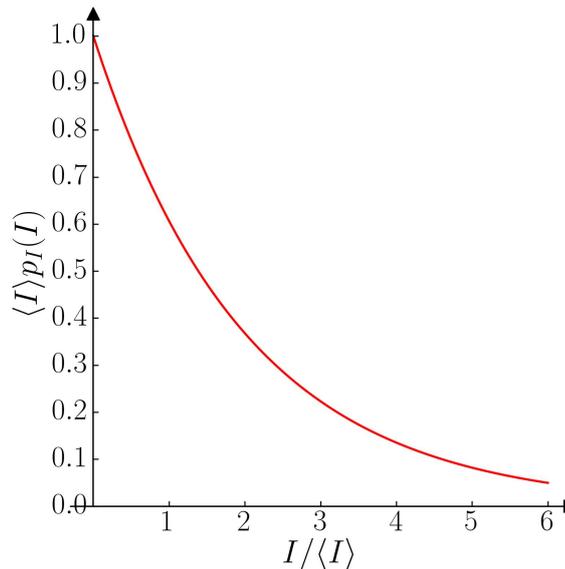
$$\langle I \rangle = \int_0^\infty I p_I(I) dI = 2\sigma^2$$

com isso, conseguimos reescrever a densidade de probabilidade como :

$$p_I(I) = \frac{1}{\langle I \rangle} \exp\left(-\frac{I}{\langle I \rangle}\right). \tag{2.40}$$

O speckle com essa distribuição de probabilidade é frequentemente chamado de speckle completamente desenvolvido. Ao contrário de outros casos de speckle, onde a distribuição de fase dos fasores contribuintes pode variar, no speckle completamente desenvolvido, a distribuição da intensidade é mais previsível e segue uma tendência exponencial negativa, como podemos ver na figura 2.11. Esse termo "completamente desenvolvido" sugere que a complexidade do padrão é plenamente manifestada, e a uniformidade na distribuição de intensidade [21, 46].

Figura 2.11: A função de densidade exponencial negativa.



Fonte: Autor, 2023.

<sup>8</sup>Considerando  $u = -I/2\sigma^2$ ,  $\Rightarrow du = -dI/2\sigma^2$ . Com isso, obtemos  $\langle I \rangle = -2\sigma^2 \int_{-\infty}^0 u \exp u du$ , onde resolvendo essa integral por partes, encontramos que o resultado dela é -1.

Uma quantidade relevante para o nosso trabalho é o contraste, definido por:

$$C = \frac{\sigma_I}{\langle I \rangle}, \quad (2.41)$$

onde  $\sigma_I$  é o desvio padrão da intensidade. Essa medida nos ajuda a avaliar a intensidade das flutuações em um padrão de speckle em relação à sua intensidade média. Em outras palavras, o contraste nos fornece uma indicação de quão significativas são as variações de intensidade em relação ao valor médio.

Para essa distribuição exponencial, temos que o desvio padrão da intensidade é<sup>9</sup>

$$\begin{aligned} \sigma_I &= \langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2 = 2\langle I \rangle^2 - \langle I \rangle^2 = \langle I \rangle^2 \\ &\Rightarrow \sigma_I = \langle I \rangle, \end{aligned} \quad (2.42)$$

e, para uma distribuição exponencial, o contraste é:

$$C = \frac{\sigma_I}{\langle I \rangle} = 1, \quad (2.43)$$

caracterizando um speckle completamente desenvolvido. Essa condição de contraste igual a 1 fornece um valor de referência para avaliar o grau de flutuações em um determinado padrão de speckle. Em um speckle completamente desenvolvido, as flutuações de intensidade são tão intensas quanto a própria intensidade média, indicando uma distribuição de intensidade muito homogênea.

Assim, delineamos o tratamento estatístico do formalismo de speckle, destacando que a intensidade de um padrão de speckle totalmente desenvolvido segue uma densidade de probabilidade exponencial negativa. Dado que a distribuição exponencial descreve o comportamento da amplitude de speckle totalmente desenvolvida, podemos referir-nos a ela como speckle de Rayleigh. No entanto, padrões de speckle que não seguem essa distribuição são denominados não-Rayleigh, como no caso em que um fasor constante é adicionado à soma fasorial.

Entretanto, ao considerarmos o tratamento estatístico do speckle de luz, surge a seguinte indagação: como descreveremos essa estatística para um sistema quântico de duas partículas interagindo localmente em um meio fracamente desordenado? No entanto, antes de respondermos a essa questão, apresentaremos nos capítulos seguintes a importância e os principais resultados tanto do modelo de uma única partícula, que será extremamente relevante em nossa descrição estatística, quanto do nosso modelo de duas partículas interagindo.

Ao avançarmos na compreensão desses modelos, estaremos melhor equipados para abordar os desafios inerentes à descrição estatística de sistemas quânticos complexos, oferecendo uma base sólida para a análise de speckle.

---

<sup>9</sup>Nesse caso, é necessário calcular a seguinte integral:  $\langle I^2 \rangle = \int_0^\infty I^2 p_I(I) dI$ . Para isso, usamos a mesma mudança de variável utilizada para encontrar  $\langle I \rangle$ , ou seja,  $u = -I/2\sigma^2 \Rightarrow du = -dI/2\sigma^2$ . Dessa forma, a integral obtida é  $\langle I^2 \rangle = 4\sigma^4 \int_{-\infty}^0 u^2 e^u du$ . Agora, integrando por partes, temos:  $\langle I^2 \rangle = 4\sigma^4 \left( -2 \int_{-\infty}^0 u e^u du \right) = 4\sigma^4 (-2)(-1) = 2(4\sigma^4) = 2(2\sigma^2)^2 = 2\langle I \rangle^2$ .

# Capítulo 3

## Estruturas cristalinas e desordenadas e o modelo de duas partículas

### 3.1 Sistemas de rede Cristalina

No estado sólido, as estruturas cristalinas são compostas por átomos ou moléculas dispostos de maneira regular e periódica no espaço. Essas estruturas cristalinas são exclusivas dos sólidos, sendo observadas em uma ampla variedade de materiais, como metais, que exibem arranjos cristalinos. A característica distintiva dessas estruturas é a sua regularidade e repetição periódica. A menor unidade dessa estrutura é chamada de "célula primitiva". Assim, podemos entender que o volume total de um cristal é formado pela união de várias células primitivas, mantendo a periodicidade da rede cristalina[50].

A consequência dessa regularidade é que a rede permanece inalterada para translações sobre distâncias que são múltiplos inteiros do período da rede. Isso é válido tanto para um cristal ideal infinito quanto para um cristal finito sujeito a condições periódicas de contorno.

O conceito fundamental aqui é a *rede de Bravais*, nomeada em homenagem a Auguste Bravais[51, 52]. Uma rede de Bravais(tridimensional, conforme mostrada na figura 3.1(b)) é um conjunto discreto de vetores não coplanares<sup>1</sup> fechado sob as operações de adição e subtração vetorial, de modo que a soma ou diferença de dois vetores pertencentes ao conjunto continue pertencendo ao conjunto. Os vetores que descrevem os pontos da rede de Bravais podem ser expressos como uma combinação linear de vetores base, chamados de *vetores da rede*, conforme a equação:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3. \quad (3.1)$$

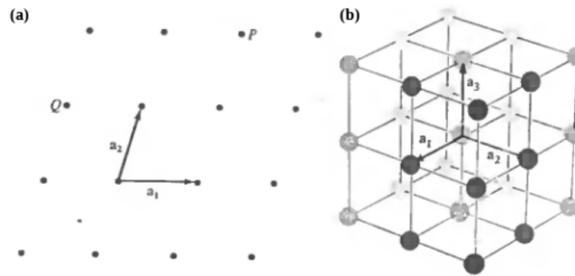
A Figura 3.1 ilustra uma rede bidimensional e tridimensional. Os pontos representam as unidades do cristal que se repetem na mesma estrutura, e os vetores primitivos têm a mesma direção, independentemente do ponto de referência na rede.

No entanto, é importante notar que a concepção da rede de Bravais não reflete

---

<sup>1</sup>Vale destacar que os vetores da rede de Bravais só são coplanares em uma rede tridimensional.

Figura 3.1: Rede de Bravais (a) bidimensional e (b) tridimensional.



Fonte : Retirada da referência [50].

completamente a realidade, uma vez que em cristais naturais, muitas células unitárias são substituídas por impurezas ou apresentam deformações na rede. Essas alterações conferem características únicas aos materiais, influenciando suas propriedades térmicas, ópticas e eletrônicas.

A seguir iremos apresentar o primeiro modelo de condução puramente quântico, proposto por F. Bloch. Em seu modelo ele incorporou a organização periódica dos íons, como acabamos de ver e levou em conta a influência dos íons sobre os elétrons[53].

## 3.2 Modelo de Bloch

O modelo de Bloch foi o primeiro modelo de condução a levar em consideração essa organização periódica dos íons. Bloch baseou seu modelo em uma estrutura cristalina periódica, incorporando interações com os íons por meio de um potencial periódico  $U(\vec{r})$ . Os íons da rede, organizados de maneira regular em posições fixas e espaçados uniformemente. Como resultado, o potencial gerado por esses íons segue a regularidade da rede de Bravais, representada pelo vetor  $\vec{a}$ :

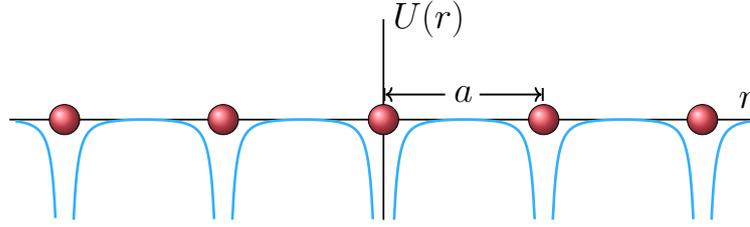
$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{a}). \quad (3.2)$$

A Figura 3.2 apresenta uma representação do potencial periódico  $U(\vec{r})$  gerado pela organização cristalina dos íons em uma rede. O gráfico destaca a periodicidade da estrutura cristalina, onde os íons ocupam posições fixas e estão espaçados uniformemente ao longo do eixo  $r$ . Cada círculo vermelho representa um íon na rede. As curvas azuis ilustram como o potencial varia espacialmente devido à distribuição periódica dos íons na rede cristalina. A forma específica das curvas é determinada pela natureza do potencial, que depende da interação entre os elétrons e os íons na estrutura cristalina. O padrão repetitivo das curvas reflete a repetição periódica da disposição dos íons na rede.

Para entender as propriedades dos elétrons em uma rede cristalina, Bloch propôs resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\mathcal{H}\psi(\vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (3.3)$$

Figura 3.2: Ilustração do padrão típico de um potencial cristalino.



Fonte : Autor, 2023.

onde temos que  $\mathcal{H}$  é o operador hamiltoniano,  $\psi(\vec{r})$  é a função de onda do elétron,  $\hbar$  é a constante reduzida de Planck,  $U(\vec{r})$  é o potencial periódico associado à rede cristalina e  $E$  é a energia do elétron.

Devido a periodicidade da rede, encontramos que a solução da função de onda tem a forma<sup>2</sup>

$$\psi_{\vec{k}}(r) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(r), \quad (3.4)$$

onde  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  representa a função que incorpora a periodicidade da rede, significando que  $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a})$ . Esta equação é conhecida como *teorema de Bloch*. Outra maneira de expressar essa equação é por meio da seguinte relação:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.5)$$

O Teorema de Bloch é fundamental na teoria da condução em sólidos cristalinos. Ele estabelece que as soluções para a equação de Schrödinger de um elétron em um potencial periódico são caracterizadas pela multiplicação de uma função periódica  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  — que incorpora a periodicidade da rede cristalina — por um fator exponencial complexo  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , onde  $\vec{k}$  é o vetor de onda. Dessa forma, a função de onda do elétron em um cristal pode ser expressas como uma combinação de ondas planas moduladas pela estrutura periódica da rede cristalina. Devido a essa propriedade, a função de onda eletrônica se estende por toda a rede, caracterizando um comportamento metálico.

Utilizando a aproximação *tight-binding* [50] para discretizar o hamiltoniano de Bloch. Nesta aproximação, consideramos que os elétrons estão fortemente ligados aos íons, resultando em estados localizados nos íons. Cada um desses estados possui um custo energético de ligação  $\epsilon_n$ , refletindo a energia de acoplamento do elétron ao íon  $n$ . Além disso, devemos assumir que a superposição entre os estados localizados é desprezível, garantindo que esses estados se assemelhem aos de um elétron ligado a um íon isolado. Contudo, essa superposição deve ser grande o suficiente para que os íons estejam acoplados. Dessa forma, introduziremos o termo  $J_{n,m}$  (chamaremos de termo de *hopping*), como sendo o parâmetro que governa o acoplamento entre os íons  $n$  e  $m$ . Por simplicidade, assumiremos que  $J_{n,m} = J_{m,n}$ , uma vez que o hamiltoniano é hermitiano. Esse termo de *hopping* é responsável por possibilitar o movimento dos elétrons entre diferentes íons, adi-

---

<sup>2</sup>Demonstração do *teorema de Bloch* pode ser encontrada na ref.[50].

cionando um elemento dinâmico ao nosso modelo. Essa descrição "tight-binding" oferece uma abordagem clara e controlada para entender a interação entre elétrons e íons em um sólido cristalino.

Vamos expressar o Hamiltoniano de Bloch para uma rede com  $N$  sítios usando a abordagem *tight-binding*. Nesse contexto, o Hamiltoniano pode ser formulado da seguinte maneira:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N (\epsilon_n c_n^\dagger c_n - \sum_{m=1, m \neq n} J_{n,m} c_m^\dagger c_n), \quad (3.6)$$

onde  $c_n^\dagger$  e  $c_n$  são, respectivamente, os operadores de criação e aniquilação. O termo  $\epsilon_n$  representa os elementos da diagonal, associados à interação *onsite*. Essencialmente, este termo descreve a energia de um elétron interagindo localmente em um sítio específico da rede. Uma vez que a rede é cristalina, todos os íons no sistema são idênticos, resultando em um custo energético de interação com os íons uniforme em toda a rede, sendo o mesmo para toda a rede. O termo de *hopping*  $J_{n,m}$ , que compreende os elementos fora da diagonal, é responsável pela mobilidade do elétron na cadeia. Este termo cinético permite que os elétrons se desloquem entre diferentes sítios. Devido à simetria de translação presente no Hamiltoniano de Bloch, o valor de  $J_{n,m}$  é constante em toda a rede.

Diante desse cenário, escreveremos o hamiltoniano 3.6, usando a aproximação de primeiros vizinhos<sup>3</sup> com  $m = \pm 1$  e, sem perda de generalidade, definimos o referencial de energia  $\epsilon_n = 0$ . Dessa forma, o Hamiltoniano pode ser reescrito como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{n=1}^N (c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n) \quad (3.7)$$

onde consideramos  $J_{n,n\pm 1} = J$ , tendo em vista o sistema cristalino com simetria translacional.

Abordamos numericamente a equação secular  $\det[H - \varepsilon I] = 0$ , onde, inicialmente, estamos focados nos autovalores da hamiltoniana. Para realizar a diagonalização da matriz e extrair os autovalores, utilizamos a linguagem de programação FORTRAN, empregando as bibliotecas BLAS[54] e LAPACK[55]. Com os autovalores em mãos, calculamos uma quantidade física: a Densidade de Estados Normalizada.

A expressão para a densidade de estados é dada por:

$$DOS(E) = \frac{1}{N} \sum_n \delta(E - E_n), \quad (3.8)$$

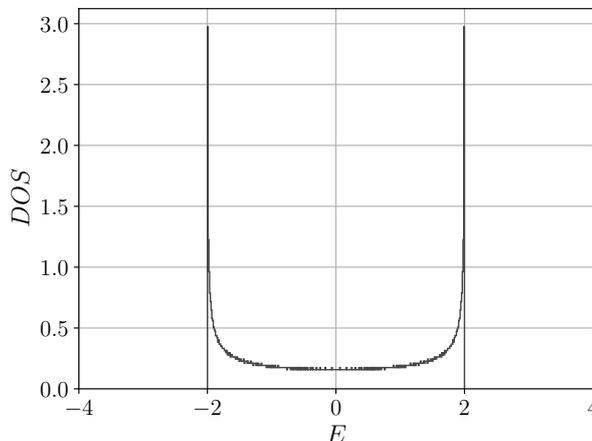
onde  $N$  é o tamanho da cadeia. Essencialmente, essa expressão quantifica o número de níveis de energia disponíveis para um elétron em um intervalo  $E + dE$ . Através da

---

<sup>3</sup>A aproximação de primeiros vizinhos é uma técnica comum em física da matéria condensada para simplificar a descrição de interações entre partículas em uma rede. No contexto da teoria de bandas, essa aproximação foca nas interações entre átomos adjacentes, ou seja, aqueles que são os primeiros vizinhos uns dos outros na estrutura cristalina.

densidade de estados podemos entender como os estados de energia estão distribuídos no sistema.

Figura 3.3: Densidade de estados para um rede cristalina com  $N = 1000$ .



Fonte : Autor, 2023.

Na figura 3.3, temos a densidade de estados para uma cadeia de tamanho  $N = 1000$ , com  $\varepsilon = 0$  e  $J = 1$ . A distribuição de energia é simétrica, evidenciando um maior número de estados ocupados nas extremidades da rede. Esse padrão revela a presença de singularidades de Van Hove<sup>4</sup>. A singularidade de Van Hove destaca-se pela concentração de estados em regiões específicas da banda de energia. Notavelmente, a  $DOS$  assume um maior número de estados nas extremidades da banda, indicando uma extensão significativa ao longo da rede. Este fenômeno sugere uma considerável mobilidade dos elétrons, estendendo-se por toda a estrutura cristalina. Além disso, observamos que as energias estão delimitadas dentro de um intervalo de  $[-2, 2]$ , onde podemos escrevê-las como:

$$E = \varepsilon - 2J\cos(ka), \quad (3.9)$$

que obtemos ao resolver a equação de Schrödinger independente do tempo, como mostrado no apêndice A.

Vamos agora explorar os aspectos dinâmicos deste modelo resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle. \quad (3.10)$$

Para abordar essa equação, utilizaremos uma solução na forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n |n\rangle, \quad (3.11)$$

---

<sup>4</sup>Uma singularidade de Van Hove é basicamente um ponto não suave na densidade de estados (DOS) de um sólido cristalino.

onde  $|n\rangle$  são os estados da cadeia. Ao aplicar essa solução, encontramos uma relação de recorrência (eq. A.9, encontrada no apêndice A):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_n(t) = -J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}), \quad (3.12)$$

esta expressão descreve a dinâmica do pacote eletrônico ao longo da cadeia. Nesta equação,  $i$  representa a unidade imaginária e  $\hbar$  a constante de Planck. Conhecida como a *Equação de Schrödinger Discreta* (DSE), essa formulação captura a evolução temporal dos estados quânticos na cadeia, considerando o acoplamento entre sítios vizinhos.

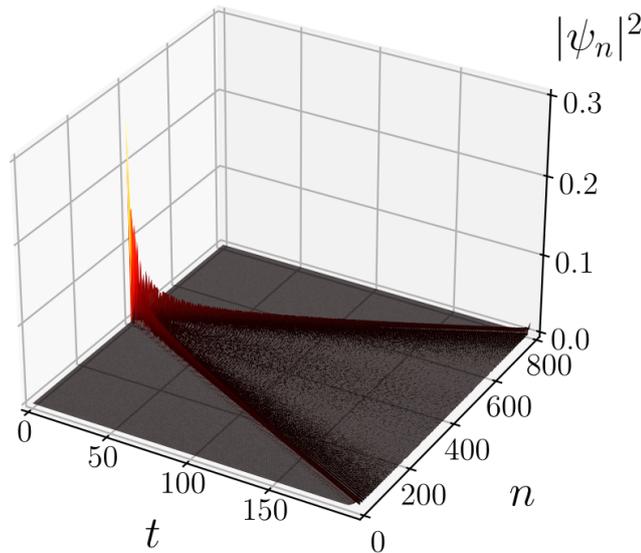
Resolvemos numericamente a equação acima através da expansão em série de Taylor do operador evolução temporal em FORTRAN,

$$\Gamma(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{l_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}, \quad (3.13)$$

onde  $l_0$  é a ordem da expansão considerando  $\hbar = 1$ . Assim, a função de onda em um tempo  $\Delta t$  é representada por  $|\psi(\Delta t)\rangle = \Gamma(\Delta t)|\psi(t=0)\rangle$ . Para iniciar a evolução temporal, adotamos uma condição inicial do tipo delta, concentrando toda a função de onda no centro da rede.

Na Figura 3.4, apresentamos a evolução temporal da função de onda em uma rede  $N = 800$ , evoluindo até  $t = 200$ . Como podemos observar, a função de onda evolui ao longo do tempo, demonstrando claramente sua extensão por toda a rede, conforme previsto inicialmente por Bloch. Esse fenômeno sugere que os elétrons, inicialmente concentrados em uma região específica da rede, gradualmente se dispersam por todos os sítios da rede cristalina.

Figura 3.4: Evolução temporal da função de onda em uma rede com  $N = 800$ .



Fonte : Autor, 2023.

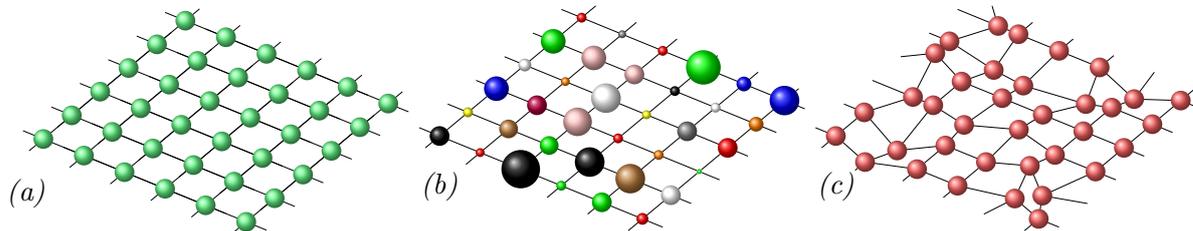
Apesar de sua simplicidade, o modelo de Bloch desempenhou um papel significativo ao elucidar fatores importantes, como a teoria de bandas, e ao oferecer uma explicação para a diferenciação entre materiais condutores, semicondutores e isolantes, proposta inicialmente por Wilson[56]. No entanto, mesmo sendo fundamental para compreender diversos fenômenos físicos, reconhece-se que a introdução de novos elementos, como imperfeições na rede e interações elétron-elétron, pode modificar o comportamento da função de onda. Em outras palavras, o sistema pode manifestar características inéditas que não eram contempladas pelo modelo de Bloch. A seguir, veremos como essas imperfeições atuam no sistema, promovendo a localização do pacote de ondas.

### 3.3 Modelo de Anderson

O modelo de Bloch desempenhou um papel fundamental na exploração e compreensão de diversos fenômenos físicos. No entanto, é importante ressaltar que estruturas cristalinas perfeitas são extraordinariamente difíceis de ser encontradas na natureza. A realidade é que tanto os materiais naturais quanto aqueles fabricados em laboratórios frequentemente exibem imperfeições em suas estruturas. Essas imperfeições são intrínsecas e resultam de uma variedade de fatores. Esses defeitos alteram as propriedades físicas dos materiais, como propriedades térmicas, ópticas e elétricas.

Uma abordagem que incorpora essas imperfeições foi proposta por *P.W. Anderson* na década de 50 [57]. Essas imperfeições são denominadas desordens e são introduzidas no sistema por meio de uma distribuição aleatória, seja no termo de energia potencial, caracterizando uma desordem composicional, onde cada átomo é diferente, ou no termo de energia cinética, caracterizando uma desordem estrutural, onde os espaçamentos entre os átomos variam. A representação dessas situações pode ser observada na Figura 3.5, em que a Figura 3.5(a) representa uma rede cristalina, a Figura 3.5(b) ilustra a desordem composicional, e a Figura 3.5(c) mostra a desordem estrutural.

Figura 3.5: Ilustração de uma rede com desordem: (a) representa o caso sem desordem, (b) apresenta desordem composicional e (c) mostra a desordem estrutural.



Fonte : Autor, 2023.

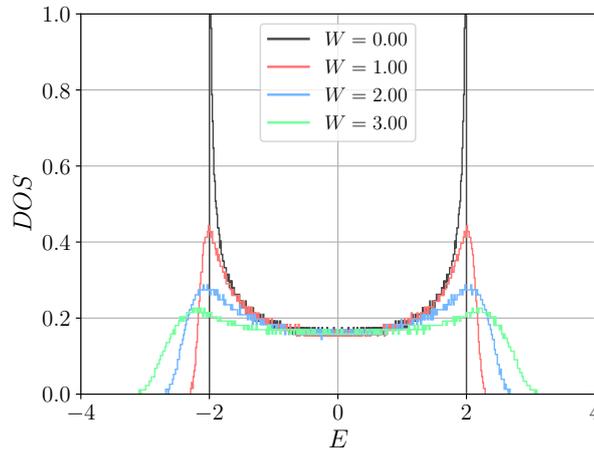
Diante desse contexto, na equação 3.6 da hamiltoniana de Bloch, a presença de desordem provoca variações nos valores das distribuições de energia no sítio (*onsite*) e nos termos de transição (*hopping*), os quais agora assumem valores aleatórios dentro do intervalo  $[-W/2, W/2]$ , onde  $W$  representa a largura da desordem. Mantendo as aproximações anteriores, podemos expressar a hamiltoniana desse modelo da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N (\epsilon_n c_n^\dagger c_n - J(c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n)), \quad (3.14)$$

Nesse contexto, consideramos que apenas o potencial *onsite* é aleatório, enquanto as interações de *hopping* entre os primeiros vizinhos permanecem constantes, conforme feito por *Anderson* em seu trabalho[57]. Para compreendermos de maneira geral o impacto da desordem no sistema, realizamos as mesmas análises realizadas anteriormente no caso de uma rede cristalina.

Utilizando a hamiltoniana 5.1, procederemos à diagonalização exata, resolvendo a equação secular para obter o espectro de energia. Com base nesse espectro, calcularemos a densidade de estados, conforme expresso pela equação 3.8 e representado na figura 3.6. Destaca-se que a presença da desordem tem o efeito de suavizar a singularidade de Von Hove. À medida que a intensidade da desordem aumenta, essa singularidade torna-se menos acentuada, indicando uma modificação na distribuição dos estados eletrônicos devido à influência da desordem no sistema. Essa alteração resulta em uma resposta mais suave no espectro de densidade de estados, onde a desordem tende a aumentar o intervalo das energias ocupadas, seguindo a relação  $|E| \leq 2J + W/2$  [58]. Essa expressão evidencia a simetria presente mesmo diante da desordem no sistema. A dispersão dos níveis de energia torna a densidade de estados mais contínua, evitando a divergência abrupta associada à singularidade de Von Hove. A ausência dessa divergência é um forte indicativo da presença de estados localizados.

Figura 3.6: Densidade de estados para uma cadeia desordenada no modelo de Anderson, considerando a aproximação de primeiros vizinhos, para diversos valores de largura de desordem  $W$ . Para uma rede com  $N = 1000$  e 200 amostras.



Fonte : Autor, 2023.

Agora, com a intenção de realizar a análise temporal dos elétrons em um meio desordenado, conforme feito anteriormente, resolveremos a equação de Schrödinger dependente do tempo. Obtém-se a seguinte relação de recorrência (eq. A.9, encontrada no apêndice A):

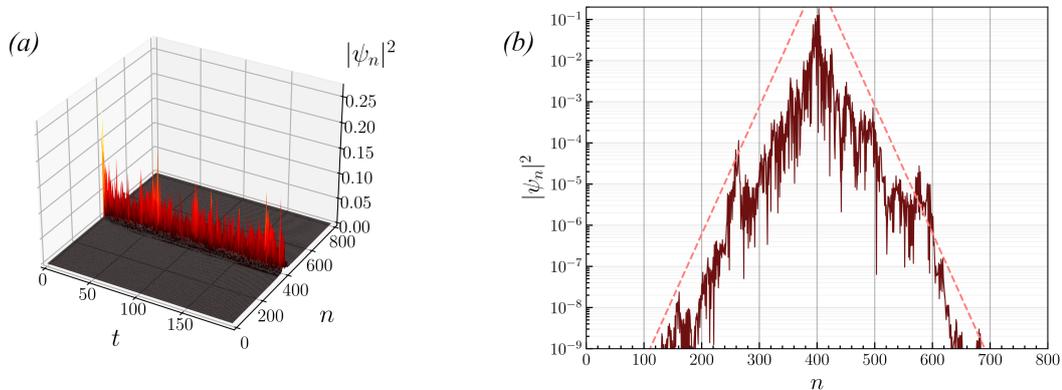
$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_n(t) = -\epsilon_n \psi_n - J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}). \quad (3.15)$$

Assim como na seção anterior, iremos desenvolver um código em FORTRAN para simular a evolução temporal do sistema utilizando a expansão em série de Taylor do operador de evolução temporal, conforme a equação 4.21 (conforme mostrado na Figura 3.7(a)). Neste caso, aplicamos uma condição inicial do tipo delta, também posicionada no centro da rede.

Um dos principais resultados do modelo de Anderson foi a identificação da localização espacial das funções de onda. Em outras palavras, dependendo do grau de desordem no sistema, a função de onda não se estende por toda a rede. Para uma desordem fraca, a função de onda se estende pela rede, porém perde a coerência de fase, de tal forma que o comportamento do sistema é tipicamente metálico [59, 60, 61, 62]. Entretanto, para um valor de desordem forte, temos a localização da função de onda. Esse fenômeno é conhecido como *localização de Anderson*. Uma característica distintiva dessa localização é o comportamento exponencialmente localizado das funções de onda. Isso implica que a probabilidade de encontrar a partícula diminui rapidamente à medida que nos afastamos da região onde ela está inicialmente localizada.

Ao observarmos a comparação entre a Figura 3.4 (situação sem desordem) e o caso com desordem, representado na Figura 3.7(a), torna-se evidente que a função de onda não se estende mais por toda a rede na presença de desordem. Em vez disso, a função de onda permanece localizada próxima à sua posição inicial. A Figura 3.7(b) apresenta o perfil do pacote de ondas em um instante de tempo  $t = 200$ , representado em escala semi-logarítmica. Esse gráfico ilustra o perfil exponencialmente localizado da função de onda [63]. O envelope da função de onda é descrito pela expressão  $e^{-|n-\langle n \rangle|/l}$ , em que  $l$  é o comprimento de localização e  $\langle n \rangle$  é a posição média do pacote. Essa formulação destaca como a probabilidade de encontrar a partícula diminui exponencialmente à medida que nos afastamos da posição média do pacote.

Figura 3.7: (a) Evolução temporal da função de onda em uma rede desordenada,  $W = 2$ , com  $N = 800$  (b) perfil exponencialmente localizado da função de onda, linha tracejada representa  $e^{-|n-\langle n \rangle|/l}$  com  $\langle n \rangle \approx 400$  e  $l \approx 14$ .



Fonte : Autor, 2023.

Após as descobertas pioneiras de Anderson, o fenômeno da localização induzida

pela presença de desordem foi prontamente e extensivamente explorado em diversas áreas. Isso inclui pesquisas em óptica [64, 65, 66], condensados de Bose-Einstein [67, 68, 69, 70] e transporte eletrônico [57, 59, 71].

Uma contribuição notável que merece destaque é a Teoria da Escala desenvolvida por Elihu Abrahams e colaboradores [59], baseada no trabalho de Thouless [72]. Nesse contexto, Thouless considerou um sólido com volume  $(2L)^d$ , onde  $L$  representa o comprimento do sólido e  $d$  é a dimensão do sistema. Nesse cenário, as unidades fundamentais deixam de ser sítios individuais e passam a ser caixas de volume que contêm muitos sítios. Nessa abordagem, a Teoria da Escala propõe uma única quantidade, conhecida como condutância generalizada, que controla a transição entre estados estendidos e localizados. Os pesquisadores demonstraram que, para dimensões  $d > 2$ , a transição poderia ocorrer. Por outro lado, em sistemas de baixa dimensionalidade, onde  $d \leq 2$ , não existiam estados estendidos na presença de desordem.

Entretanto, estudos subsequentes abordando diferentes componentes revelaram comportamentos não previstos pela teoria da escala. Foi observada a presença de correlações entre termos que eram independentemente aleatórios, um fenômeno que emergiu como um fator capaz de promover estados estendidos. Além disso, para distribuições pseudoaleatórias, a presença de estados estendidos também foi verificada [73, 74, 75].

Até este ponto, discutimos amplamente a localização de Anderson, um fenômeno bem estabelecido na física [1]. Na mecânica quântica, esse problema é frequentemente abordado para partículas não interagentes, como já mencionado anteriormente. A presença da interação no sistema, para levar o sistema a fenômenos como a localização de muitos corpos[2]. Nas seções seguintes, revisaremos um dos primeiros trabalhos relacionados à interação e, posteriormente, apresentaremos uma abordagem mais simples para estudar a influência da interação no sistema.

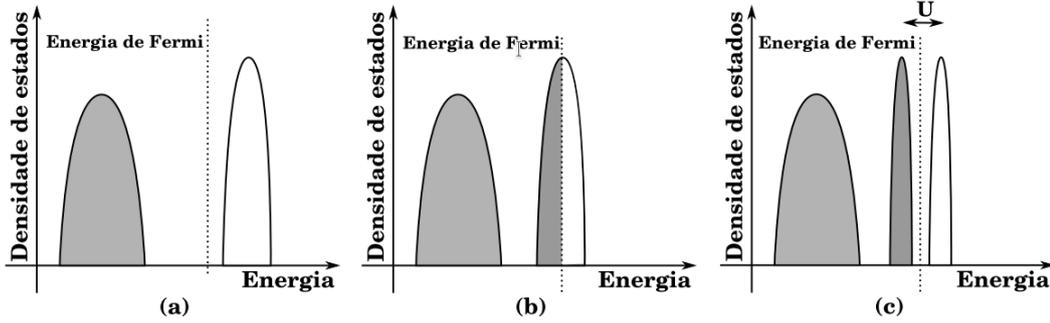
### 3.4 Modelo de Mott e Hubbard

Em 1937, Mott e Peierls apresentaram um dos primeiros estudos sobre interação elétron-elétron, propondo que essa interação fosse responsável pelo caráter isolante de alguns óxidos de metais de transição[76]. A explicação para esse comportamento foi formulada por Mott em 1949[77]. Ele sugeriu que a formação de um gap de energia, impedindo a condução, resulta da competição entre a energia coulombiana,  $U$ , e a energia cinética (*hopping*) entre sítios vizinhos. Mott demonstrou que a interação pode modificar as propriedades de transporte do material, identificando assim os materiais com caráter isolante devido a essa interação como "*isolantes de Mott*".

Para compreender melhor o comportamento desses isolantes, é útil recorrer à teoria de bandas. Na teoria de bandas, a distinção entre isolantes e condutores é baseada no preenchimento da estrutura eletrônica. No isolante, a banda de valência está completamente preenchida, como mostrado na Figura 3.8(a), enquanto no condutor, a banda está parcialmente preenchida, conforme ilustrado na Figura 3.8(b).

Sob a perspectiva de Mott, a interação entre elétrons divide a banda parcialmente preenchida em duas sub-bandas, colocando o nível de Fermi em um gap de energia. Isso

Figura 3.8: Representação gráfica da densidade de estados para o modelo de elétrons não interagentes para um sistema (a) isolante e (b) condutor. (c) Densidade de estados para o modelo de elétrons fracamente interagentes.

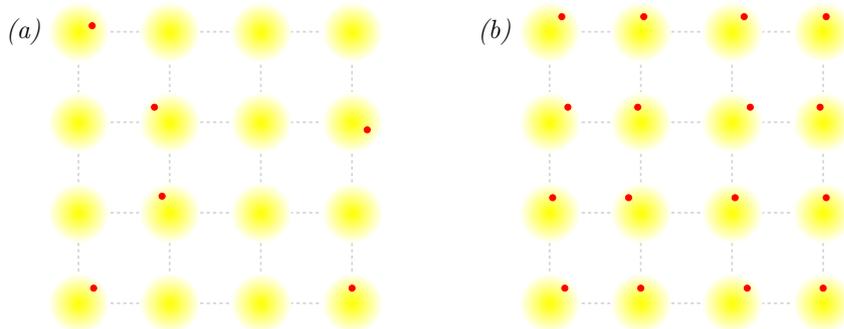


Fonte: Retirada da referência [78].

resulta no caráter isolante do material, onde a energia de interação ( $U$ ) controla se o sistema é isolante ou metálico.

O isolante de Mott pode ser descrito da seguinte maneira: em uma rede com poucos elétrons, como podemos ver na figura 3.9(a), adicionar outro elétron à rede tem baixo custo energético, pois a probabilidade de encontrar outro elétron no mesmo sítio é pequena. No entanto, em uma rede semi-preenchida (um elétron por sítio, figura 3.9(b)), o custo energético envolve repulsão coulombiana, aumentando o custo de adição do elétron em  $U$ . Isso resulta no gap de Mott, conforme ilustrado na Figura 3.8(c). Quanto maior o custo de dupla ocupação (dado por  $U$ ), mais a propagação do elétron é inibida, levando o sistema a apresentar comportamento isolante. Essa transição metal-isolante causada pela interação entre elétrons é denominada "transição de Mott"[79].

Figura 3.9: Ilustração do *isolante de Mott*. Constituída de uma rede quadrada, onde as bolinhas amarelas representam os átomos, espaçados igualmente os pontos vermelhos representam os na rede.



Fonte: Autor, 2023.

A hamiltoniana que descreve a transição de Mott foi proposta por Hubbard em 1964[80, 81, 82]:

$$H = -t \sum_{i,j} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad (3.16)$$

onde o sistema é governado pelos parâmetros  $t$  (termo de hopping), que representa a amplitude de probabilidade para um elétron pular entre sítios vizinhos, e  $U$  (termo de interação coulombiana), que se manifesta quando elétrons ocupam o mesmo orbital.

O modelo de Mott e Hubbard foi importante para explicar fenômenos que não se alinhavam com a teoria de bandas e recebeu suporte de estudos experimentais [83, 84]. No entanto, apesar de sua aparente simplicidade, o modelo apresenta desafios, como o fato de o termo de interação não ser suficientemente pequeno para ser tratado pela teoria da perturbação. Além disso, o esforço computacional é significativo, especialmente quando o número de partículas aumenta, uma vez que o número de estados cresce exponencialmente com o número de partículas, e soluções exatas são conhecidas apenas para o caso unidimensional [85, 86, 87, 88, 89].

Diante desse cenário desafiador, tem-se amplamente explorado sistemas que envolvem apenas duas partículas interagentes. Essa abordagem tem sido amplamente estudada devido à sua relativa simplicidade em comparação com sistemas mais complexos. A limitação a duas partículas oferece um terreno de pesquisa rico em recursos, possibilitando uma análise detalhada de interações e comportamentos emergentes [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. Esse cenário mais controlado proporciona uma maneira acessível de investigar aspectos fundamentais da interação entre partículas.

### 3.5 Modelo de Dois Elétrons interagentes

Como mencionado anteriormente, sistemas que envolvem interação entre elétrons apresentam desafios significativos, levando à necessidade de modelos mais simplificados. Em 1994, Shepelyansky explorou o modelo de dois elétrons interagindo em uma rede desordenada [12]. Seu objetivo era compreender os resultados da coexistência da interação entre elétrons e desordem em anéis mesoscópicos [90, 91, 92, 93].

O modelo proposto por Shepelyansky incorpora o termo de interação *onsite* de Hubbard a um potencial desordenado. Em sua pesquisa, ele demonstrou que, quando as partículas estão inicialmente distantes uma da outra, a influência da interação entre elas é mínima. No entanto, se a distância entre as partículas se aproxima do comprimento de localização de uma partícula  $\xi_1$ , existe a possibilidade de as partículas se propagarem coerentemente por uma distância muito maior do que o comprimento de localização das duas partículas  $\xi_2$ , enfraquecendo a localização de Anderson. Além disso, a relação entre os comprimentos de localização segue a seguinte expressão:

$$\xi_2 \propto U^2 \xi_1^2. \quad (3.17)$$

Assim, o modelo consegue capturar aspectos físicos de sistemas com muitas partículas [90, 91, 92, 93], conferindo grande importância ao trabalho de Shepelyansky.

Esse cenário instigou uma série de estudos relacionados ao modelo. Inicialmente, os primeiros trabalhos concentraram-se em validar o fenômeno inicialmente observado por Shepelyansky, no qual a presença da interação enfraquecia a localização de Anderson [94, 13, 95]. Em numerosos estudos subsequentes, os mecanismos responsáveis pelo aumento

do comprimento da localização na presença de interação partícula-partícula foram investigados com maior profundidade [13, 14, 15, 16, 96]. O aumento do comprimento de localização também foi documentado em cadeias quase periódicas [18]. Como vimos, isso ocorre porque a interação pode gerar novos estados mais propensos a se propagar por longas distâncias.

# Capítulo 4

## Sistemas de Duas partículas

No capítulo anterior, discutimos as contribuições de *Mott e Hubbard*, que, embora significativas, apresentam algumas dificuldades. Diante dessas limitações, o modelo proposto por *Shelpelyansk* para duas partículas interagentes emerge como uma alternativa atraente, uma vez que, além de ser um modelo relativamente simples, é capaz de resgatar aspectos físicos de sistemas de muitos corpos.

Além disso, mesmo na ausência de interação, correlações clássicas e quânticas foram investigadas em sistemas de duas partículas [4, 5]. As correlações quânticas, nesse contexto, originam-se da simetrização das funções de onda para acomodar a natureza bosônica ou fermiônica das partículas [7].

No contexto delineado, abordaremos o sistema de duas partículas interagentes de duas maneiras distintas. Inicialmente, consideraremos as partículas como indistinguíveis, permitindo que a função de onda obedeça ao postulado de simetrização da mecânica quântica. Em seguida, abordaremos o caso em que as partículas são tratadas como distinguíveis [97, 98]. Neste capítulo, realizaremos uma revisão abrangente das abordagens previamente mencionadas, acompanhada da exposição do formalismo necessário para extrair as propriedades de interesse

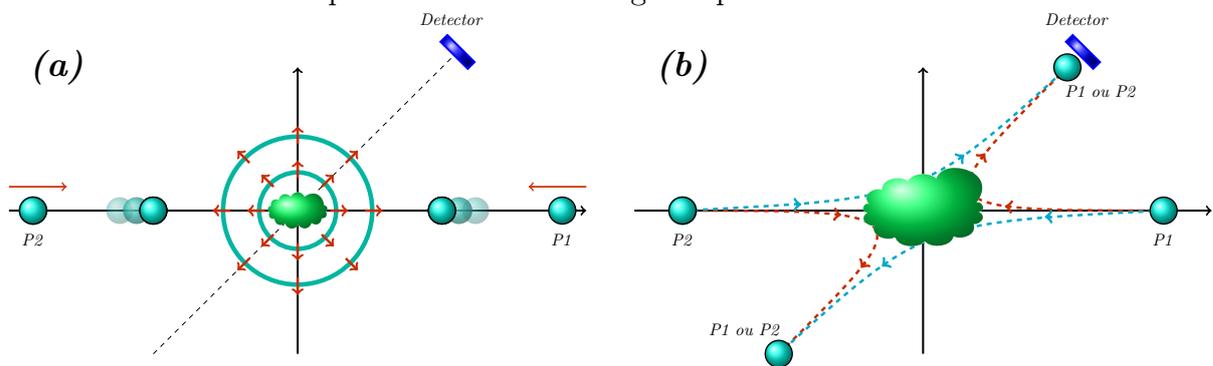
### 4.1 Sistema de partículas idênticas

Na mecânica quântica, partículas idênticas são verdadeiramente indistinguíveis. Essa característica decorre da impossibilidade intrínseca de especificar mais do que um conjunto completo de observáveis para tais partículas, impedindo-nos de atribuir rótulos distintos a cada uma.

Para ilustrar esse conceito, considere um experimento de espalhamento envolvendo duas partículas idênticas. Inicialmente, essas partículas são preparadas em pacotes de ondas localizadas e bem separadas, movendo-se uma em direção à outra, como representado na figura 4.1(a).

Inicialmente, podemos rotular cada uma das partículas, mas durante a colisão, ocorre uma superposição espacial dos pacotes de ondas. Essa sobreposição resulta na

Figura 4.1: Colisão entre duas partículas idênticas no referencial do centro de massa: representação esquemática da densidade de probabilidade das duas partículas. **(a)** Antes da colisão, os dois pacotes de ondas,  $P1$  e  $P2$ , estão claramente separados e podem ser rotulados. Quando se movem para colidir na origem, os dois pacotes de ondas se sobrepõem, representado pela nuvem verde. Após a colisão, a densidade de probabilidade torna-se diferente de zero em uma região com formato de casca esférica, cujo raio aumenta com o tempo. Devido à identidade das duas partículas, torna-se impossível determinar a qual pacote de ondas ( $P1$  ou  $P2$ ) uma partícula detectada estava associada antes da colisão. **(b)** Representação esquemática de dois tipos de "caminhos" que o sistema poderia ter seguido ao passar do estado inicial para o estado encontrado na medição, uma vez que na região da colisão (nuvem verde) como os dois pacotes são idênticas, não podemos determinar o caminho que foi efetivamente seguido por cada uma.



Fonte: Autor, 2023.

perda da capacidade de rotular as partículas de maneira não ambígua. Após a colisão, ao detectarmos uma partícula no detector, torna-se impossível determinar se ela pertencia ao pacote  $P1$  ou  $P2$ .

Visualizando duas trajetórias clássicas, nas quais a partícula detectada é associada a  $P1$  ou  $P2$ , conforme ilustrado na Figura 4.1**(b)**. Suponhamos que a direção definida pelo detector corresponda a um vetor  $\vec{P}$ . Dado que estamos considerando a colisão no referencial do centro de massa, onde o momento total é nulo, a outra partícula deve ter necessariamente um momento  $-\vec{P}$ .

No entanto, a priori, não temos conhecimento sobre qual das partículas estamos medindo. Isso nos leva às seguintes possibilidades:  $|1 : \vec{P}, 2 : -\vec{P}\rangle$  e  $|1 : -\vec{P}, 2 : \vec{P}\rangle$ . Além disso, podemos também utilizar uma combinação linear desses estados, resultando em uma ambiguidade onde obtemos um conjunto idêntico de autovalores ao realizar a medição. Essa ambiguidade também influencia os estados iniciais. Considere o caso de duas partículas idênticas de spin  $1/2$ , onde apenas os graus de liberdade são relevantes. Se inicialmente preparamos as partículas de modo que a componente do spin total ao longo do eixo  $z$  seja nula, uma partícula terá spin  $\hbar/2$ , enquanto a outra terá spin  $-\hbar/2$  ao longo do eixo  $z$ . Com  $S_1$  e  $S_2$  como os observáveis associados a cada partícula, a base ortonormal dos vetores de estados de  $S_{1z}$  e  $S_{2z}$  será  $|\epsilon_1 = \pm, \epsilon_2 = \pm\rangle$ .

Dentro desse cenário, dois estados possíveis poderiam descrever a situação de spin total zero ao longo do eixo  $z$ :

Dentro desse cenário dois estados possíveis poderiam descrever a situação de spin total zero ao longo do eixo  $z$ :

$$|\phi^{(1)}\rangle = |+, -\rangle, \quad |\phi^{(2)}\rangle = |-, +\rangle. \quad (4.1)$$

Entretanto, usando o princípio da superposição, podemos criar uma mistura de estados de spin diferentes. Através da combinação linear:

$$|\phi\rangle = \alpha|+, -\rangle + \beta|-, +\rangle \quad (4.2)$$

onde  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , podemos representar uma situação em que não podemos distinguir qual partícula tinha spin para cima e qual tinha spin para baixo. Essa incerteza na escolha do estado inicial é chamada de "Degenerescência de Troca". Mais adiante, exploraremos como resolver esse problema específico. Por enquanto, vamos discutir uma ferramenta útil para lidar com essa degenerescência.

### 4.1.1 Operador de Permutação

Vamos considerar inicialmente duas partículas distinguíveis. Assumiremos também que elas possuem o mesmo spin, de modo que seus subespaços são isomórficos, ou seja, há uma correspondência biunívoca entre os estados dos espaços das duas partículas. Para ilustrar, uma base completa em cada subespaço pode ser expressa como  $|\vec{R}, m_s\rangle$ , onde  $\vec{R} \in \mathbb{R}^3$  e  $m_s = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$ , sendo  $s$  o spin da partícula.

Podemos representar o espaço da partícula 1, denotado por  $\xi(1)$ , com a base  $|u_i\rangle; i = 1, 2, \dots$ , da mesma forma que o espaço da partícula 2, denotado por  $\xi(2)$ , pode ser descrito com a base  $|u_j\rangle; j = 1, 2, \dots$ . Em termos de função de onda, isso pode ser expresso da seguinte maneira:

$$\begin{cases} \xi(1) : \langle \vec{r}_1, m_1 | u_i \rangle = u_i(\vec{r}_1, m_1), \\ \xi(2) : \langle \vec{r}_2, m_2 | u_j \rangle = u_j(\vec{r}_2, m_2). \end{cases} \quad (4.3)$$

Para formar uma base para o espaço total das duas partículas, realizamos o produto tensorial dos espaços individuais, resultando em  $\xi = \xi(1) \otimes \xi(2)$ . Essa base pode ser representada como  $|1 : u_i; 2 : u_j\rangle$ , sendo importante observar que na notação utilizada, o número antes do elemento da base (1 ou 2) indica a qual espaço (ou partícula) pertence aquele estado.

Essa notação nos permite escrever:

$$\langle \vec{r}_1, m_1; \vec{r}_2, m_2 | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle = u_i(\vec{r}_1, m_1) u_j(\vec{r}_2, m_2). \quad (4.4)$$

É importante notar que  $|2 : u_j; 1 : u_i\rangle = |2 : u_j; 1 : u_i\rangle$ , uma vez que  $\xi(1) \otimes \xi(2) = \xi(2) \otimes \xi(1)$ . Isso ocorre porque, em ambos os casos, a partícula 1 está no estado  $|u_i\rangle$  e a partícula 2 está no estado  $|u_j\rangle$ .

No entanto, vale ressaltar que  $|1 : u_j; 2 : u_i\rangle \neq |1 : u_i; 2 : u_j\rangle$  quando  $i \neq j$ . Isso ocorre porque a ordem dos estados nas partículas importa. De fato,  $\langle 1 : u_i; 2 : u_j | 1 :$

$u_j; 2 : u_i\rangle = \delta_{i,j}$ , indicando que as partículas ocupam estados distintos quando  $i$  é diferente de  $j$ .

Diante deste contexto, vamos agora definir um operador linear  $P_{2,1}$  cuja ação na base  $\xi$  é expressa por:

$$P_{2,1}|1 : u_i; 2 : u_j\rangle = |1 : u_j; 2 : u_i\rangle. \quad (4.5)$$

Essa ação consiste em trocar os estados das partículas. Algumas propriedades importantes desse operador são as seguintes:

1.  $P_{2,1}$  é hermitiano. Para mostrar isso, considere um elemento de matriz genérico:

$$\langle 1 : u_i; 2 : u_j | P_{2,1} | 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} \rangle = \langle 1 : u_i; 2 : u_j | 1 : u_j; 2 : u_i \rangle = \delta_{i,j} \delta_{i',j'}$$

Mas

$$\begin{aligned} \langle 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} | P_{2,1}^\dagger | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle &= (\langle 1 : u_i; 2 : u_j | P_{2,1} | 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} \rangle)^* = \\ &= \langle 1 : u_i; 2 : u_j | 1 : u_{j'}; 2 : u_{i'} \rangle = \delta_{i,j} \delta_{i',j'} \end{aligned}$$

Com isso, vemos que  $P_{2,1}$  e  $P_{2,1}^\dagger$  têm os mesmos elementos da matriz anterior.

2.  $P_{2,1}^{-1} = P_{2,1}$ , ou seja,  $P_{2,1}$  é um operador unitário.

Assim, ao definirmos  $|\psi'\rangle \in \xi$  na base  $|1 : \vec{r}_1, m_1; 2 : \vec{r}_2, m_2\rangle$  para as posições  $\vec{r}_k$  e componentes de spin  $\hat{S}_{kz}$ , com  $k = 1, 2$ , como:

$$|\psi'\rangle = P_{2,1}|\psi\rangle \quad (4.6)$$

podemos calcular:

$$\begin{aligned} \langle 1 : \vec{r}_1, m_1; 2 : \vec{r}_2, m_2 | \psi' \rangle &= \langle 1 : \vec{r}_1, m_1; 2 : \vec{r}_2, m_2 | P_{2,1} | \psi \rangle, \\ &= \langle 1 : \vec{r}_2, m_2; 2 : \vec{r}_1, m_1 | \psi \rangle, \\ \psi'_{m_1, m_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \psi_{m_2, m_1}(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \end{aligned} \quad (4.7)$$

ou seja, a ação de  $P_{2,1}$  nas funções de onda consiste em trocar as coordenadas das partículas. Essa transformação é evidenciada pela equação 4.7, refletindo a permutação das partículas e a consequente troca das suas coordenadas.

Além disso, podemos determinar os autovalores de  $P_{2,1}$ . Como  $P_{2,1}$  é hermitiano, seus autovalores são reais. Começando com a equação secular  $P_{2,1}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle$ , aplicamos  $P_{2,1}$  nesta equação, obtendo:

$$\begin{aligned} P_{2,1}^2|\psi_\lambda\rangle &= \lambda P_{2,1}|\psi_\lambda\rangle = \lambda^2|\psi_\lambda\rangle, \\ \Rightarrow \lambda^2 &= 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1. \end{aligned}$$

Assim, os autoestados de  $P_{2,1}$  com autovalor 1 são chamados de *simétricos*, enquanto os que possuem autovalor  $-1$  são chamados de *anti-simétricos*. Em outras palavras:

$$\begin{cases} P_{2,1}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \Rightarrow |\psi_S\rangle \text{ é simétrico,} \\ P_{2,1}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \Rightarrow |\psi_A\rangle \text{ é anti-simétrico.} \end{cases}$$

Essa distinção é fundamental para compreender o comportamento das funções de onda sob a permutação de partículas. Os estados simétricos estão associados a configurações onde a troca de partículas resulta em uma função de onda que permanece inalterada (como é o caso de partículas bosônicas, como veremos na próxima seção). Por outro lado, os estados anti-simétricos estão relacionados a configurações onde a troca de partículas resulta em uma função de onda multiplicada por  $-1$  (como é o caso de partículas fermiônicas, como veremos na próxima seção).

Considere agora os operadores:

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{2,1}), \quad A = \frac{1}{2}(1 - P_{2,1}) \quad (4.8)$$

Esses operadores são hermitianos, uma vez que  $P_{2,1}$  também é hermitiano. Além disso, podemos verificar que:

$$\begin{aligned} S^2 &= \frac{1}{4}(1 + 2P_{2,1} + P_{2,1}^2) = \frac{1}{4}(2 + 2P_{2,1}) = \frac{1}{2}(1 + P_{2,1}) = S, \\ A^2 &= \frac{1}{4}(1 - 2P_{2,1} + P_{2,1}^2) = \frac{1}{4}(2 - 2P_{2,1}) = \frac{1}{2}(1 - P_{2,1}) = A. \end{aligned}$$

Dessa forma,  $S$  e  $A$  são projetores, o que significa que ao serem aplicados a um estado, eles projetam esse estado em um subespaço específico. Em outras palavras, eles agem como "interruptores" que selecionam partes específicas do espaço de Hilbert associado ao sistema quântico.

Esses projetores são particularmente interessantes, pois projetam em subespaços ortogonais<sup>1</sup>. Isso implica que, para estados quaisquer  $|\psi\rangle$  e  $|\psi'\rangle$ , temos:

$$|\phi\rangle = S|\psi\rangle; \quad |\phi'\rangle = A|\psi\rangle \quad \Rightarrow \langle\phi|\phi'\rangle = 0,$$

ou seja, os estados resultantes da aplicação desses projetores são ortogonais entre si, contribuindo para a separação clara entre os subespaços associados a partículas simétricas e anti-simétricas.

Além disso, é importante observar que esses subespaços são complementares<sup>2</sup>, o

<sup>1</sup> $[S,A] = 0 \Rightarrow SA = \frac{1}{4}(1+P_{2,1})(1-P_{2,1}) = \frac{1}{4}(1-P_{2,1}^2) = 0$  e  $AS = \frac{1}{4}(1-P_{2,1})(1+P_{2,1}) = \frac{1}{4}(1-P_{2,1}^2) = 0$ , ou seja, isso implica que os operadores compartilham autovetores em comum e, portanto, os subespaços associados a esses autovetores são ortogonais entre si.

<sup>2</sup>Subespaços complementares são dois subespaços em um espaço vetorial tal que a soma deles é igual a todo o espaço. Isso ocorre com  $S$  e  $A$ :  $S + A = \frac{1}{2}(1 + P_{2,1}) + \frac{1}{2}(1 - P_{2,1}) = 1$ .

que significa que a aplicação conjunta dos projetores  $S$  e  $A$  cobre todo o espaço de Hilbert associado ao sistema quântico.

Portanto, para estados  $|\psi\rangle$  quaisquer,  $S|\psi\rangle$  é simétrico e  $A|\psi\rangle$  é anti-simétrico:

$$\begin{aligned} P_{2,1}S|\psi\rangle &= \frac{1}{2}P_{2,1}(1 + P_{2,1})|\psi\rangle = \frac{1}{2}(P_{2,1} + 1)|\psi\rangle = S|\psi\rangle, \\ P_{2,1}A|\psi\rangle &= \frac{1}{2}P_{2,1}(1 - P_{2,1})|\psi\rangle = \frac{1}{2}(P_{2,1} - 1)|\psi\rangle = -A|\psi\rangle, \end{aligned}$$

onde notamos que  $S|\psi\rangle$  é um autoestado de  $P_{2,1}$  com autovalor 1, tornando  $S$  um seme-trizador. Da mesma forma,  $A|\psi\rangle$  é um autoestado de  $P_{2,1}$  com autovalor -1, classificando  $A$  como um anti-simetrizador. Vale ressaltar que, nesta análise, consideramos o caso de partículas distinguíveis. Além disso, veremos a seguir que esses operadores desempenham um papel fundamental na descrição de estados simétricos e anti-simétricos em sistemas com partículas idênticas.

## 4.2 Postulado da Simetrização

Podemos enunciar o postulado da simetrização da seguinte forma:

Quando um sistema contém várias partículas idênticas, apenas determinados vetores de estado do seu espaço de estados são capazes de descrever os seus estados físicos. A natureza desses vetores de estado físicos depende se as partículas idênticas são completamente simétricas ou completamente antissimétricas em relação à troca entre elas. Partículas para as quais os vetores de estado físicos são simétricos são chamadas de *bósons*, enquanto aquelas para as quais são antissimétricos são chamadas de *férmions*.

O postulado da simetrização impõe restrições ao espaço de estados de um sistema de partículas idênticas, limitando-o de maneira que não seja mais tratado como um espaço de partículas distinguíveis. Em vez disso, ele é representado pelo produto tensorial,  $\xi$ , dos subespaços de estados individuais das partículas que compõem o sistema. Esse postulado estabelece que apenas um subespaço de  $\xi$  é permitido, denominado  $\xi_A$  ou  $\xi_S$ , dependendo se as partículas são bósons ou férmions.

Empiricamente, as partículas com spin semi-inteiro, como elétrons, prótons e nêutrons, são classificadas como férmions, enquanto aquelas com spin inteiro, como fótons e mésons, são consideradas bósons.

Uma consequência importante para nós desse postulado é que, ao considerarmos um sistema com duas partículas idênticas, a degenerescência de troca ocorre devido à possibilidade de um estado de duas partículas, onde uma ocupa o estado  $|\phi\rangle$  e a outra ocupa o estado  $|\chi\rangle$ , ser descrito, em princípio, por uma combinação linear.

$$|\psi\rangle = \alpha|1 : \phi; 2 : \chi\rangle + \beta|1 : \chi; 2 : \phi\rangle, \quad (4.9)$$

com  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , sendo  $|\phi\rangle$  e  $|\chi\rangle$  ortogonais.

O postulado da simetrização estabelece que apenas estados que são autoestados de  $P_{2,1}$  são permitidos. Dessa forma, podemos expressar esses estados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} P_{2,1}|\psi\rangle &= \alpha|1 : \chi; 2 : \phi\rangle + \beta|1 : \phi; 2 : \chi\rangle, \\ &= \lambda\alpha|1 : \phi; 2 : \chi\rangle + \lambda\beta|1 : \chi; 2 : \phi\rangle, \end{aligned}$$

para bósons, onde  $\lambda = 1$ , e assumindo que o estado  $|\psi_s\rangle$  está normalizado (ou seja,  $\alpha = \beta$ ), obtemos:

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1 : \phi; 2 : \chi\rangle + |1 : \chi; 2 : \phi\rangle]. \quad (4.10)$$

Enquanto para férmions, onde  $\lambda = -1$ , e novamente considerando que  $|\psi_s\rangle$  está normalizado (ou seja,  $\alpha = -\beta$ ), temos:

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1 : \phi; 2 : \chi\rangle - |1 : \chi; 2 : \phi\rangle]. \quad (4.11)$$

Isso elimina completamente a degenerescência de troca. Vale ressaltar que se  $|\chi\rangle = |\phi\rangle$ , então:

$$\begin{cases} |\psi_S\rangle = |1 : \phi; 2 : \phi\rangle, \\ |\psi_A\rangle = 0. \end{cases} \quad (4.12)$$

Concluimos, assim, que para férmions, é impossível ocupar o mesmo estado. Isso é conhecido como o Princípio da Exclusão de Pauli, que afirma que partículas fermiônicas não podem compartilhar o mesmo estado.

### 4.3 Duas partículas em uma rede cristalina

Dentro do contexto apresentado nas seções anteriores, vamos inicialmente introduzir o formalismo que será utilizado para abordar o problema de duas partículas distinguíveis. Em seguida, destacaremos a abordagem que será empregada para descrever partículas idênticas em uma rede linear, utilizando as ferramentas discutidas anteriormente. Além disso, buscaremos reproduzir alguns resultados importantes presente na literatura, que serão úteis para a compreensão dos resultados do nosso trabalho.

Como vimos no capítulo 3, iremos considerar duas partículas distinguíveis em uma rede cristalina linear, constituída de  $N$  átomos, onde o hamiltoniano que descreve o sistema é:

$$H = J \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + h.c.) + \sum_{j=1}^N [\varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) + U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j] \quad (4.13)$$

onde  $a_j, b_j (a_j^\dagger, b_j^\dagger)$  são os operadores aniquilação (criação) de cada uma das partículas em um sítio  $j$ .  $J$  é o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos,  $\varepsilon_j$  é o termo de energia *onsite* e  $U$  é o termo de interação coulombiana quando as partículas estão no mesmo sítio.

### 4.3.1 Partículas distinguíveis

Conforme mencionado anteriormente, vamos começar analisando o caso de duas partículas distinguíveis (por exemplo, dois elétrons com spins opostos, conforme descrito na literatura[99, 17, 100]). Nesse contexto, como as partículas são distinguíveis, podemos expandir a função de onda na representação de Wannier da seguinte forma:

$$|\psi(m, n)\rangle = \sum_{m,n} f_{m,n} |\psi(m, n)\rangle_D. \quad (4.14)$$

Nessa expressão, as variáveis  $m$  e  $n$  indicam as posições das duas partículas no sistema. É importante notar que os autoestados do hamiltoniano existem no espaço formado por todas as combinações possíveis das posições dessas duas partículas. Em outras palavras, estamos expandindo nosso espaço em  $N^2$  funções de onda, o que significa que o espaço de Hilbert tem uma dimensão de  $2$ . Cada combinação única de  $m$  e  $n$  contribui para a descrição do sistema.

Utilizando a notação da segunda quantização, expressamos nossos vetores de estados base como:

$$|\psi(m, n)\rangle_D = b_n^\dagger a_m^\dagger |0, 0\rangle, \quad (4.15)$$

onde  $|0, 0\rangle$  é o estado de vácuo. Vale ressaltar que o subíndice  $D$  no vetor de estado indica que estamos lidando com o caso de partículas distinguíveis. Inicialmente, realizaremos uma análise estática, ou seja, resolveremos a equação de Schrödinger independente do tempo; com isso, resolveremos:

$$H|\psi(m, n)\rangle = E|\psi(m, n)\rangle. \quad (4.16)$$

Dessa forma, como mostrado no apêndice B, obtemos a seguinte relação de recorrência:

$$Ef_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})f_{m,n} \quad (4.17)$$

A equação acima nos fornece a forma matricial do hamiltoniano 4.13 para o caso em que assumimos as partículas como sendo distinguíveis. Por exemplo, considerando uma rede com 3 sítios, teremos que o espaço de hilbert sera formado por 9 estado, lembrando que  $N^2$  e o numero todos de estados do espaço de hilbert, onde teremos a seguinte matriz:

$N = 3$	$ 1, 1\rangle$	$ 1, 2\rangle$	$ 1, 3\rangle$	$ 2, 1\rangle$	$ 2, 2\rangle$	$ 2, 3\rangle$	$ 3, 1\rangle$	$ 3, 2\rangle$	$ 3, 3\rangle$
$\langle 1, 1 $	$2\varepsilon + U$	$J$	$0$	$J$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$
$\langle 1, 2 $	$J$	$2\varepsilon$	$J$	$0$	$J$	$0$	$0$	$0$	$0$
$\langle 1, 3 $	$0$	$J$	$2\varepsilon$	$0$	$0$	$J$	$0$	$0$	$0$
$\langle 2, 1 $	$J$	$0$	$0$	$2\varepsilon$	$J$	$0$	$J$	$0$	$0$
$\langle 2, 2 $	$0$	$J$	$0$	$J$	$2\varepsilon + U$	$J$	$0$	$J$	$0$
$\langle 2, 3 $	$0$	$0$	$J$	$0$	$J$	$2\varepsilon$	$0$	$0$	$J$
$\langle 3, 1 $	$0$	$0$	$0$	$J$	$0$	$0$	$2\varepsilon$	$J$	$0$
$\langle 3, 2 $	$0$	$0$	$0$	$0$	$J$	$0$	$J$	$2\varepsilon$	$J$
$\langle 3, 3 $	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$J$	$0$	$J$	$2\varepsilon + U$

Neste contexto, procederemos à diagonalização da matriz mencionada, considerando um  $N$  correspondente ao tamanho da rede. Utilizaremos a equação secular  $\det(H - \lambda I) = 0$ , seguindo uma abordagem semelhante à empregada no caso do Modelo de Bloch. Da mesma maneira, conduziremos uma análise estática do sistema ao calcular a densidade de estados, como previamente apresentado na Equação 3.8. Entretanto, é importante destacar que substituiremos  $N$  por  $N^2$ . Desta forma, a expressão para a densidade de estados torna-se:

$$DOS(E) = \frac{1}{N^2} \sum_{l=1}^{N^2} \delta(E_l - E), \quad (4.18)$$

onde assumiremos  $\varepsilon = 0$  e  $J = 1$ , para o caso onde temos uma rede cristalina.

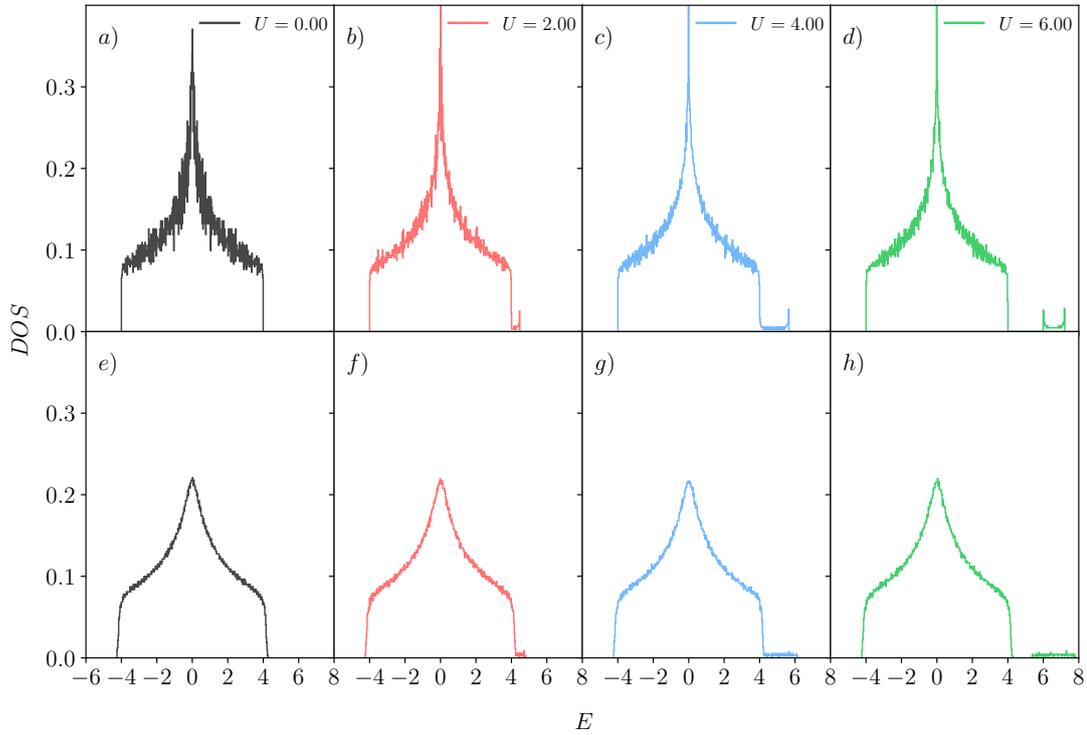
Na Figura 4.2, apresentamos a densidade de estados para duas partículas em uma rede com  $N = 115$  e  $U = 0, 2, 6$  nos casos cristalino e desordenado. Inicialmente, ao analisarmos a densidade de estados em uma rede cristalina, conforme mostrado nas figuras 4.2(a-c), observamos a singularidade de van Hove no centro da banda. Conforme aumentamos a interação entre as partículas, ocorre a formação de uma sub-banda de estados ligados, relacionados aos estados de dupla ocupação, para valores de interação maiores que zero [101]. No entanto, para valores pequenos de interação, ocorre uma sobreposição entre a banda principal (estados não ligados) e a sub-banda (estados ligados), exemplificado no caso de  $U = 2$ . No entanto, a sub-banda torna-se mais evidente à medida que a interação entre as partículas se fortalece, como evidenciado em  $U = 6$ , onde ela está completamente separada da banda principal.

Claro e colaboradores [102]<sup>3</sup> demonstraram por meio de cálculos analíticos que os limites da banda de estados ligados são dados por  $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ . Assim, a separação das duas bandas ocorre somente para  $U > 4J$ . Se considerarmos  $U = 6$ , a banda de estados ligados deve estar entre  $6 \leq E \leq 7.21$ , como evidenciado na Figura 4.2(c).

Na Figura 4.2(d-f), examinamos a densidade de estados para uma rede com desordem composicional, semelhante ao que foi discutido no Capítulo 3, assumindo uma

<sup>3</sup>Na densidade de estados na ausência de interação, temos a mesma configuração apresentada no modelo de Anderson 2D. Este resultado também foi apresentado por Claro e colaboradores [102], que propõem uma equivalência entre o modelo para  $N$  elétrons interagentes em uma rede unidimensional e o modelo de um único elétron em uma rede  $N$ -dimensional, com as interfaces dividindo o espaço em domínios simétricos.

Figura 4.2: Densidade de estados para  $U = 0, 2, 6$  e  $N = 115$  de duas partículas interagentes em uma rede (a-d) cristalina e (d-f) desordenada.



Fonte : Autor, 2024.

largura de desordem  $W = 1$ . Podemos identificar o mesmo comportamento previamente observado para partículas não interagentes, conforme discutido no Capítulo 3. Nesse contexto, observamos que a densidade de estados para este cenário exibe um caráter irregular. Além disso, a singularidade de *van Hove* é suavizada, e também, ocorre um alargamento tanto na banda de estados ligados quanto na banda de estados não ligados.

Semelhante ao caso sem desordem, à medida que aumentamos a interação entre as partículas, observamos o surgimento da sub-banda de estados ligados. Este fenômeno mantém uma coerência com o que foi discutido anteriormente, destacando a influência da interação nas propriedades da densidade de estados, mesmo quando a desordem composicional está presente.

Com o objetivo de analisar os aspectos dinâmicos deste sistema, consideramos a função de onda que deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle. \quad (4.19)$$

Realizando um procedimento análogo ao realizado anteriormente<sup>4</sup>, obtemos:

<sup>4</sup>Destacamos que, para este caso, assumimos que as amplitudes dependem do tempo. Ou seja, as funções de onda na representação de Wannier são escritas como:  $|\psi(m, n)\rangle = \sum_{m,n} f_{m,n}(t) |\psi(m, n)\rangle_D$ .

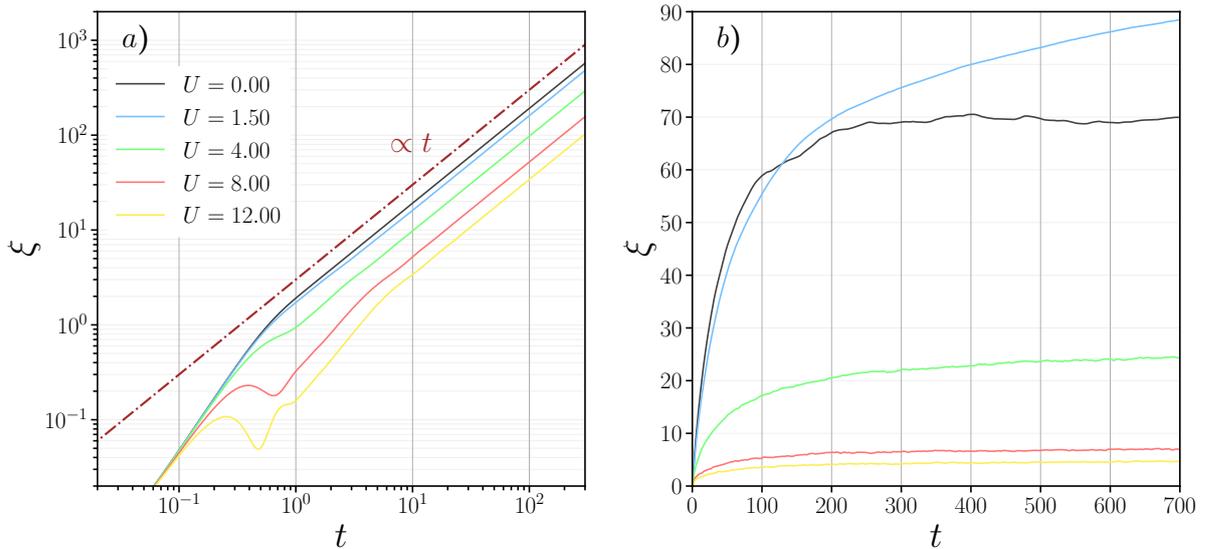
$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{m,n}(t) = & J(f_{m+1,n}(t) + f_{m,n+1}(t) + f_{m-1,n}(t) \\
 & + f_{m,n-1}(t)) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})f_{m,n}(t).
 \end{aligned} \quad (4.20)$$

Para realizar a evolução temporal, desenvolvemos um programa em **FORTRAN** para resolver a equação acima utilizando a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal:

$$\Gamma(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{l=1}^{l_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}, \quad (4.21)$$

onde  $l_0$  é a ordem da expansão. Assim, a função de onda em um tempo  $\Delta t$  é representada por  $|\psi(\Delta t)\rangle = \Gamma(\Delta t)|\psi(t=0)\rangle$ . Neste caso, usaremos uma condição inicial tipo delta, ou seja, faremos  $|\psi(t=0)\rangle = |m_0, n_0\rangle$ , onde  $m_0$  e  $n_0$  são os sítios iniciais das partículas.

Figura 4.3: Extensão espacial para o sistema de duas partículas em uma a) rede cristalina e b) desordenada com  $N = 500$  para vários valores de interação até um tempo  $t = 700$  e  $\Delta t = 0.01$ .



Fonte : Autor, 2024.

Para realizar a análise dinâmica do sistema, calcularemos a extensão espacial da função de onda, proporcionando uma ideia do raio do pacote de onda no plano formado pelas duas partículas ( $m \times n$ ):

$$\xi(t) = \sqrt{(\eta_m - \langle \eta_m(t) \rangle)^2 + (\eta_n - \langle \eta_n(t) \rangle)^2} |\psi_{m,n}(t)|^2, \quad (4.22)$$

onde

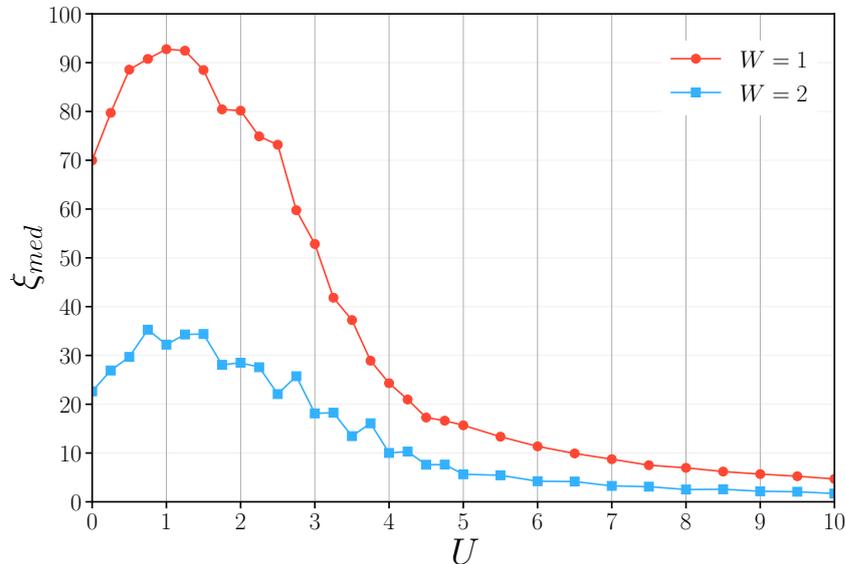
$$\langle \eta_i(t) \rangle = \sum_{m,n} \eta_i |\psi_{m,n}(t)|^2 \quad (4.23)$$

representa o centroide da função de onda (a posição média da função de onda).

Neste contexto, a Figura 4.3 apresenta a extensão espacial da função de onda, para os casos cristalino e desordenado, considerando diferentes valores de interação. Na Figura 4.3(a), observamos o caso cristalino, no qual a extensão espacial aumenta linearmente com o tempo ( $\xi \propto t$ ), independentemente do valor de interação. Esse comportamento é caracterizado como balístico[19].

Já na Figura 4.3(b), temos o caso desordenado com  $W = 1$ . Aqui, notamos que a interação entre as partículas influencia a extensão do pacote de onda. Para  $U \leq 1.5$ , a interação reduz o grau de localização do sistema. Isso é evidenciado em  $U = 1.5$ , no qual a extensão espacial aumenta em comparação com o caso  $U = 0$ , onde vemos que a saturação ocorre mais rapidamente com o tempo. No entanto, à medida que aumentamos o valor de interação, observamos um efeito oposto, no qual a extensão espacial diminui, indicando um aumento no grau de localização de Anderson.

Figura 4.4: A média da extensão espacial em função dos valores de interação entre as partículas para  $W = 1$  e  $2$  com 20 amostras. Para calcular  $\xi_{med}$ , analisamos o comportamento da extensão espacial ao longo do tempo, especificamente quando a extensão espacial satura. O procedimento é executado da seguinte maneira: considerando, por exemplo, 20 amostras para um valor específico de desordem e interação, na primeira amostra, somamos todos os valores da extensão espacial para cada ponto dentro do intervalo de tempo estabelecido. Em seguida, realizamos a divisão pela quantidade de pontos nesse intervalo de tempo. Este procedimento é repetido para todas as amostras, resultando em 20 valores. Finalmente, calculamos a média desses 20 valores correspondentes a cada amostra, obtendo, assim, nossa  $\xi_{med}$  para um dado conjunto de  $U$  e  $W$ . Este processo é repetido para cada valor de interação.



Fonte : Autor, 2022.

Na Figura 4.4, apresentamos o gráfico da extensão espacial em relação à interação entre as partículas para  $W = 1$  e  $W = 2$ . Destaca-se o comportamento não monotônico da localização [103], mencionado anteriormente. Para valores baixos de  $U$  (no intervalo

de  $0 \leq U \leq 1.5$ ), observamos um enfraquecimento da localização. No entanto, a partir de  $U \geq 1.5$ , ocorre uma inversão nesse comportamento. Vale ressaltar que esse padrão persiste para  $W = 2$ , embora não seja tão acentuado quanto para um grau de desordem mais fraco ( $W = 1$ ).

Essa análise destaca a influência significativa que a interação entre partículas exerce na dinâmica do sistema, com efeitos mais proeminentes em ambientes com menor grau de desordem. Isso nos permite compreender de forma mais clara tanto o efeito da interação entre as partículas quanto a influência da desordem nesse sistema. Esses resultados não apenas contribuem para uma compreensão mais aprofundada do sistema em estudo, mas também validam nossos códigos computacionais por meio da consistência com os resultados esperados.

Na próxima seção, abordaremos a condição em que as partículas são consideradas indistinguíveis, apresentando nossa abordagem para estudar a dinâmica nesse cenário e discutindo as motivações por trás da investigação desses casos específicos.

### 4.3.2 Partículas indistinguíveis

Da mesma forma feita no caso anterior expandiremos a função de onda na representação de Wannier:

$$|\psi(m, n)\rangle = \sum_{m, n} f_{m, n} |\psi(m, n)\rangle_S, \quad (4.24)$$

onde acessaremos os sub-espço simétrico por meio de  $|\psi(m, n)\rangle_S$  (ou  $|\psi(m, n)\rangle_A$  para o sub-espço antissimétrico), como vimos no início deste capítulo em um sistema de duas partículas podemos acessar o sub-espço simétrico ou antissimétrico por meio do postulado da simetrização. Dessa forma escreveremos o vetor de estado  $|\psi(m, n)\rangle_S$  como, usando a notação da segunda quantização:

$$|\psi(m, n)\rangle_S = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(b_n^\dagger a_m^\dagger + b_m^\dagger a_n^\dagger)|0, 0\rangle & \text{se } m \neq n, \\ b_m^\dagger a_m^\dagger |0, 0\rangle & \text{se } m = n, \end{cases} \quad (4.25)$$

já para a parte antissimétrica, teremos :

$$|\psi(m, n)\rangle_A = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(b_n^\dagger a_m^\dagger - b_m^\dagger a_n^\dagger)|0, 0\rangle & \text{se } m \neq n, \\ 0 & \text{se } m = n, \end{cases} \quad (4.26)$$

onde  $a_m^\dagger$  e  $b_n^\dagger$  são operadores de criação associados aos sitios  $m$  e  $n$  respectivamente, e  $|0\rangle$  é o estado de vácuo.

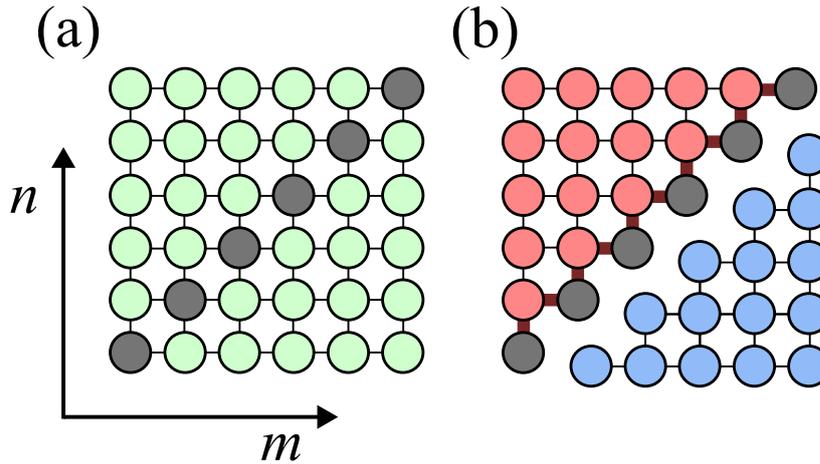
Essa metodologia é frequentemente empregada para analisar o comportamento de partículas idênticas. Um exemplo prático é a investigação de dois bósons idênticos em um conjunto de guias de ondas acoplados [7, 9, 104]. Além disso, essa abordagem também é utilizada no contexto do transporte eletrônico, especialmente ao examinar elétrons indistinguíveis espacialmente que compartilham o mesmo estado de spin [95, 105, 106]

Como mencionado anteriormente, nosso espaço de Hilbert é composto por  $N^2$  estados das duas partículas, representados como  $|m, n\rangle = b_n^\dagger a_m^\dagger |0, 0\rangle$ . No entanto, os vetores de estado  $|\psi(m, n)\rangle_S$  e  $|\psi(m, n)\rangle_A$  dividirão esse espaço de Hilbert em dois subespaços.

A combinação simétrica,  $|\psi(m, n)\rangle_S$ , incluirá os estados de dupla ocupação. Neste subespaço, as partículas interagem através do hamiltoniano de Bose-Hubbard, descrevendo bósons idênticos. Por outro lado, a combinação antissimétrica,  $|\psi(m, n)\rangle_A$ , faz com que as partículas se comportem como férmions indistinguíveis e não interagentes sem spin.

Podemos visualizar isso de maneira mais clara no espaço de estados da seguinte maneira:

Figura 4.5: Estrutura gráfica hamiltoniana de duas partículas. (a) O espaço de estados de duas partículas distinguíveis em 1D pode ser mapeado em uma matriz 2D. A diagonal com círculos pretos representa os estados de dupla ocupação. (b) A mudança de base  $|\psi(m, n)\rangle_S$  e  $|\psi(m, n)\rangle_A$  desacopla o hamiltoniano em duas partes, onde uma delas representa um sistema de bósons idênticos (círculos vermelhos) e a outra representa férmions sem spin (círculos azuis). O acoplamento entre os estados ligados bosônicos e os outros círculos na diagonal secundária é renormalizado por  $\sqrt{2}$  (arestas grossas).



Fonte: Retirada da referência [107]

Para ilustrar, consideremos uma rede com 3 sítios, resultando em um espaço total composto por 9 estados, são eles:  $\{|1, 1\rangle, |1, 2\rangle, |1, 3\rangle, |2, 1\rangle, |2, 2\rangle, |2, 3\rangle, |3, 1\rangle, |3, 2\rangle, |3, 3\rangle\}$ . Esses estados são divididos em dois subespaços. O subespaço bosônico incluirá os seguintes estados:  $\{|1, 1\rangle, |1, 2\rangle, |1, 3\rangle, |2, 2\rangle, |2, 3\rangle, |3, 3\rangle\}$ . Já o subespaço fermiônico será composto por  $\{|2, 1\rangle, |3, 1\rangle, |3, 2\rangle\}$ . Em termos gerais, os subespaços simétrico e antissimétrico conterão  $N(N + 1)/2$  e  $N(N - 1)/2$  estados, respectivamente, para cada subespaço.

É importante destacar que no subespaço bosônico, o hopping entre os estados de dupla ocupação e seus vizinhos é renormalizado (indicado pelas linhas mais grossas na Figura 4.5(b)). Isso ocorre devido ao vetor de estado  $|\psi(m, n)\rangle_S$ .

Podemos encontrar a relação de recorrência para esse caso de maneira análoga feito no apêndice B, aplicando:

$$|\psi(m, n)\rangle = \sum_{m,n} f_{m,n} |\psi(m, n)\rangle_S, \quad (4.27)$$

no hamiltoniano. Então para o caso simétrico temos as seguintes relações de recorrência:

$$\begin{cases} E f_{m,m} = J\sqrt{2}(f_{m,m+1} + f_{m,m-1}) + (2\varepsilon_m + U\delta_{m,m})f_{m,m}. \\ E f_{m,m+1} = J(\sqrt{2}f_{m+1,m+1} + f_{m,m+2} + f_{m-1,m+1} + \sqrt{2}f_{m,m}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_{m+1})f_{m,m+1}. \\ E f_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n)f_{m,n}. \end{cases}$$

Dessa forma temos a seguinte matriz para  $N = 3$ , teremos 6 estados nesse subespaço:

$N = 3$	$ 1, 1\rangle$	$ 1, 2\rangle$	$ 1, 3\rangle$	$ 2, 2\rangle$	$ 2, 3\rangle$	$ 3, 3\rangle$
$\langle 1, 1 $	$2\varepsilon_1 + U$	$J\sqrt{2}$	$0$	$0$	$0$	$0$
$\langle 1, 2 $	$J\sqrt{2}$	$\varepsilon_1 + \varepsilon_2$	$J$	$J\sqrt{2}$	$0$	$0$
$\langle 1, 3 $	$0$	$J$	$\varepsilon_1 + \varepsilon_3$	$0$	$J$	$0$
$\langle 2, 2 $	$0$	$J\sqrt{2}$	$0$	$2\varepsilon_2 + U$	$J\sqrt{2}$	$0$
$\langle 2, 3 $	$0$	$0$	$J$	$J\sqrt{2}$	$\varepsilon_2 + \varepsilon_3$	$J\sqrt{2}$
$\langle 3, 3 $	$0$	$0$	$0$	$0$	$J\sqrt{2}$	$2\varepsilon_3 + U$

Agora para a parte antissimétrica  $|\psi(m, n)\rangle$ , obtemos a seguinte relação de recorrência(encontrada no apêndice B),

$$E f_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n)f_{m,n}.$$

Assumindo  $N = 3$ , para esse subespaço teremos 3 estados e a matriz terá a seguinte forma:

$N = 3$	$ 2, 1\rangle$	$ 3, 1\rangle$	$ 3, 2\rangle$
$\langle 2, 1 $	$\varepsilon_1 + \varepsilon_2$	$J$	$0$
$\langle 3, 1 $	$J$	$\varepsilon_1 + \varepsilon_2$	$J$
$\langle 3, 2 $	$0$	$J$	$\varepsilon_1 + \varepsilon_2$

Assim, podemos observar que as matrizes obtidas descrevem os subespaços conforme discutido no início desta seção. Na parte antissimétrica, as partículas se comportam como férmions não interagentes, enquanto o subespaço simétrico contém os estados de dupla ocupação, onde as partículas se comportam como bósons idênticos.

Vamos analisar o comportamento dinâmico do sistema usando a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \quad (4.28)$$

No entanto, para evitar lidar com várias relações de recorrência, como fizemos no caso estático, vamos explorar a relação entre o hamiltoniano (equação 4.13) e o operador de permutação (equação 4.5). Observamos que  $[P, H] = 0^5$ . Isso implica que os operadores  $P$  e  $H$  compartilham os mesmos autoestados. Assim, se o estado  $|\psi(t_0)\rangle$  que descreve o sistema em um tempo específico  $t_0$ , é considerado um estado físico, então o mesmo deve ser verdadeiro para o estado  $|\psi(t)\rangle$  obtido ao resolver a equação de Schrödinger a partir do estado inicial  $|\psi(t_0)\rangle$ . Isso significa que se o estado inicial do sistema é um estado físico<sup>6</sup>, então qualquer estado subsequente do sistema, calculado usando a equação de Schrödinger, também será um estado físico.

De acordo com:

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 + \frac{dt}{i\hbar}H\right) |\psi(t)\rangle,$$

agora, aplicando  $P$  e utilizando o fato de que  $P$  e  $H$  comutam, obtemos:

$$P|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 + \frac{dt}{i\hbar}H\right) P|\psi(t)\rangle,$$

se  $|\psi(t)\rangle$  é um autovetor de  $P$  com autovalor específico, então  $|\psi(t + dt)\rangle$  também é um autovetor de  $P$  com o mesmo autovalor. Uma vez que  $|\psi(t = 0)\rangle$ , por hipótese, é completamente simétrico ou completamente antissimétrico (ou seja,  $|\psi(t = 0)\rangle = (|m_0, n_0\rangle \pm |n_0, m_0\rangle)/\sqrt{2}$ ), essa propriedade é preservada ao longo de toda a evolução [97].

O princípio da simetrização é, portanto, consistente com o postulado que descreve a evolução temporal do sistema. A equação de Schrödinger não remove o vetor de estado  $|\psi(t)\rangle$  dos subespaços  $\xi_S$  e  $\xi_A$ , quando as condições iniciais são simétricas ou antissimétricas.

Em outras palavras, se  $|\psi(t = 0)\rangle$  representa o estado inicial do sistema, então, de acordo com a equação de Schrödinger dependente do tempo, isso descreve como estado  $|\psi\rangle$

<sup>5</sup>Ao calcular o comutador  $[P, H] = PH - HP$ , obtemos:

$$\begin{aligned} PH|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{m,n} f_{m,n}[J(P|m+1, n\rangle + P|m, n+1\rangle + P|m-1, n\rangle + P|m, n-1\rangle) \\ &\quad + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})P|m, n\rangle], \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n}[J(|n, m+1\rangle + |n+1, m\rangle + |n, m-1\rangle + |n-1, m\rangle) \\ &\quad + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})|n, m\rangle], \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} HP|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{m,n} f_{m,n}[J(|n, m+1\rangle + |n+1, m\rangle + |n, m-1\rangle + |n-1, m\rangle) \\ &\quad + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})|n, m\rangle], \end{aligned}$$

então  $[P, H] = 0$ .

<sup>6</sup>Se refere a um estado físico ou um estado real do sistema.

do sistema evolui no tempo quando sujeito ao operador  $H$ . Se sabemos que  $|\psi(t=0)\rangle$  é um autoestado compartilhado de  $P$  e  $H$ , podemos afirmar que esse mesmo estado é válido para  $|\psi(t)\rangle$ . Dessa forma, a natureza desse estado inicial persiste ao longo do tempo de acordo com a evolução determinada por  $H$ . Essa persistência é uma consequência do fato de  $P$  e  $H$  compartilharem os mesmos autoestados, implicando que as propriedades associadas ao estado inicial, capturadas pelos autoestados de  $P$  e  $H$ , não mudam ao longo do tempo.

Com isso, evitamos a necessidade de encontrar relações de recorrência para cada subespaço, como foi feito no caso estático. Em vez disso, podemos empregar a relação de recorrência estabelecida para o caso de duas partículas distinguíveis, conforme a equação 4.20. Através dessa abordagem, acessamos os subespaços bosônicos e fermiônicos, determinando a condição inicial como  $|\psi(t=0)\rangle = (|m_0, n_0\rangle + |n_0, m_0\rangle)/\sqrt{2}$  para os bósons e  $|\psi(t=0)\rangle = (|m_0, n_0\rangle - |n_0, m_0\rangle)/\sqrt{2}$  para os férmions.

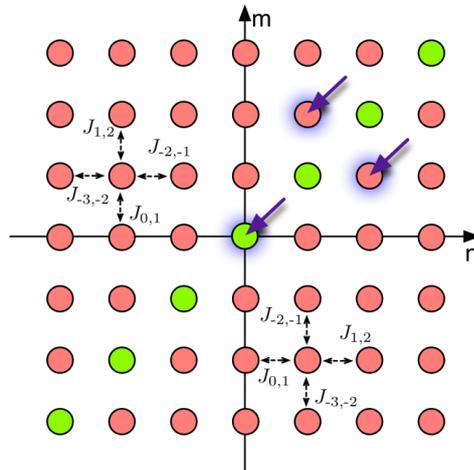
Esse sistema de duas partículas, como já citamos, desfruta de uma implementação fotônica bastante conveniente baseada em uma rede quadrada de guias de ondas acoplados usando, apenas fontes de luz clássicas [6, 7, 9, 20, 104]. Um arranjo fotônico proposto por Longhi em 2011 [20], baseado no transporte de luz espacialmente modulado em uma rede quadrada de guias de onda 2D de modo que simula o movimento de dois elétrons interagentes em uma rede unidimensional, este trabalho impulsionou a primeira observação experimental do dobramento da frequência de oscilação induzido pela interação entre as partículas. Os autores, Corriolle e al. [9], utilizaram uma rede fotônica como um sistema de hamiltoniano estendido de Bose-Hubbard de duas partículas. Uma vez que o experimento de partícula única em uma rede quadrada apresenta características típicas de um sistema de duas partículas em 1d, os autores aproveitaram-se deste fato para simular uma rede quadrada 2d projetada por guias de onda ópticos acoplados e adicionaram efeito entre as partículas através da fabricação de guias de ondas com índice de refração diferente.

Na Figura 4.6, apresentamos uma representação de guias de onda acoplados, onde o termo  $(\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})$  é influenciado pela largura e pelo índice de refração do guia de onda. A amplitude de tunelamento (nosso *hopping*), denotada por  $J$ , define a constante de acoplamento entre os guias de onda. A interação local  $U$  é alcançada, conforme mencionado anteriormente, ao fabricar guias de onda diagonais com índices de refração ou larguras diferentes em comparação com os guias de onda fora da diagonal.

Além disso, Changhyoup Lee e colaboradores [104] exploraram o efeito da interação em sistemas de caminhadas quânticas de dois elétrons em um meio desordenado tanto do ponto de vista experimental em um conjunto de guias de ondas acoplados (ver figura 4.6), quanto do ponto de vista teórico. Eles desenvolveram um modelo para descrever esse sistema e conduziram simulações numéricas para investigar a relação entre a interação e a presença de desordem. No decorrer deste estudo, os pesquisadores analisaram a função participação dos elétrons, observando um enfraquecimento na localização de Anderson, conforme já discutido anteriormente.

Entretanto, diante do contexto apresentado até o momento, a análise da relação entre as interações e a desordem não é uma tarefa simples e depende de diversos fatores. Isso inclui a propriedade específica que está sendo medida. Como vimos, a caracterização

Figura 4.6: Uma matriz de guias de onda 2D, as setas azuis representa os feixe de luz clássica coerente.



Fonte: Retirada da referência [104].

requer a obtenção simultânea de várias amplitudes da função de onda. Isso é mostrado na análise da função participação, conforme abordado por Changhyoup Lee e colaboradores [104], assim como na avaliação da extensão espacial, conforme discutido por Dias et al. [19].

Diante desse contexto, nosso trabalho propõe uma rota alternativa para obter informações importantes sobre o sistema. Nosso foco recai sobre as estatísticas de medições consecutivas de correlação do tipo Hanbury Brown-Twiss do ponto de vista local. Em um conjunto de guias de onda acoplados, isso implica monitorar a intensidade do feixe em um único guia de onda. Este procedimento gera padrões de speckle, para os quais analisamos detalhadamente todas as distribuições associadas. De forma surpreendente, o contraste de speckle é capaz de identificar com precisão a natureza das partículas e o grau de interação entre elas. Essa identificação se manifesta por desvios específicos em relação ao padrão de speckle exponencial completamente desenvolvido.

Dessa maneira, nosso objetivo é explorar a seguinte questão: que informações sobre os mecanismos físicos subjacentes à geração de speckle podem ser inferidas a partir de estatísticas locais? A título de exemplo, os autores da Referência [108] investigaram as estatísticas de speckle de dois fótons como meio de revelar informações relevantes sobre suas propriedades de emaranhamento. Esta abordagem é particularmente atrativa para fenômenos de ondas rebeldes em sistemas ópticos e quânticos. Recentemente, houve um interesse renovado no papel da desordem na geração de picos de amplitude de onda raros e de curta duração [109, 110]. Em um trabalho recente, Kirkby et al. [111] exploraram cáusticos do espaço Fock em modelos simples de Bose-Hubbard, que também estão relacionados a eventos não extremos. Nesse contexto, observamos que as correlações quânticas intrínsecas devido à identidade das partículas resultam em distribuições de cauda longa. As ondas rebeldes são frequentemente estudadas como fenômenos emergentes em equações não lineares de Schrödinger [112], descrevendo, por exemplo, condensados de Bose-Einstein [113].

---

Assim, possuímos praticamente todo o conjunto de informações essenciais tanto sobre o modelo de duas partículas interagentes quanto sobre a teoria de speckle. Resta agora compreender como abordaremos nosso modelo do ponto de vista da teoria de speckle. No próximo capítulo, detalharemos o procedimento que empregaremos, utilizando o modelo de uma partícula apresentado no Capítulo 3. Essa etapa nos permitirá, finalmente, desenvolver o formalismo de speckle para o modelo de duas partículas interagentes. Essa transição proporcionará uma visão mais clara e específica sobre como as características do speckle podem ser aplicadas e interpretadas no contexto do nosso modelo.

# Capítulo 5

## Speckle de duas partículas

Nos capítulos anteriores, exploramos conceitos já conhecidos na literatura, abordando a teoria de speckle no Capítulo 2 e examinando fenômenos relacionados às propriedades de transporte eletrônico em sistemas de uma e duas partículas nos Capítulos 3 e 4, respectivamente. Com essa base, estamos agora preparados para analisar nosso sistema quântico de duas partículas sob a perspectiva da teoria de speckle. Nossa abordagem considera um modelo de duas partículas interagindo localmente em uma rede unidimensional fracamente desordenada, com condições periódicas de contorno. Ao investigarmos as estatísticas da amplitude de transição das duas partículas, que estão relacionadas às correlações de Hanbury Brown-Twiss [4, 5, 8, 11], revelamos que as flutuações não padrões de speckle nos permitem caracterizar a natureza dessas partículas no sistema. Antes de introduzirmos o formalismo de speckle aplicado ao sistema de duas partículas, ilustraremos a abordagem por meio do modelo tight-binding unidimensional. Este capítulo é baseado em nosso artigo intitulado "*Non-Rayleigh signal of interacting quantum particles*", publicado na revista *Physical Review A* [107]. Além disso, vale destacar que este trabalho recebeu o Prêmio de Excelência Acadêmica da FAPEAL (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Alagoas), conforme o Edital Fapeal nº 03/2023 – Prêmio de Excelência Acadêmica.

### 5.1 Formalismo de speckle da dinâmica quântica de uma partícula

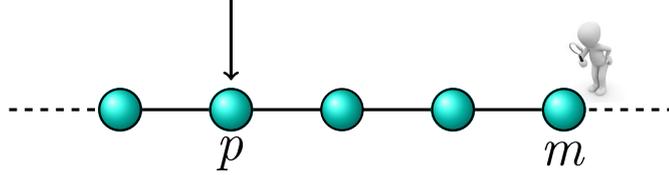
Antes de entrarmos nos detalhes do formalismo de speckle aplicado à dinâmica de duas partículas, vamos explicar essa abordagem usando como exemplo o modelo de uma partícula, como vimos no capítulo 3 é descrito pelo hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N (\epsilon_n c_n^\dagger c_n - J(c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n)), \quad (5.1)$$

onde  $J$  é o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos  $\epsilon_j$  é a energia local do sítio, distribuída aleatoriamente no intervalo de  $[-W/2, W/2]$ , sendo  $W$  a largura da desordem

no caso desordenado. No caso cristalino, consideramos  $\varepsilon_j = 0$ . Vale destacar também que a rede possui condições periódicas de contorno.

Figura 5.1: Ilustração de uma rede 1d, onde iniciamos a função de onda em um sítio  $p$  e medimos a amplitude de transição em um sítio  $m$ .



Fonte: Autor 2024.

Vamos calcular a amplitude de transição entre os sítios  $m$  e  $p$  em uma rede unidimensional, conforme mostrado na figura 5.1. Imagine que começamos com a função de onda inicial no sítio  $p$  e queremos avaliar como essa onda evolui ao longo do tempo, especificamente medindo a amplitude de transição no sítio  $m$  utilizando o operador de evolução temporal  $\mathcal{U} = e^{-i\mathcal{H}t}$ . Dessa forma, faremos:

$$\begin{aligned} f_m^p &= \langle p | \mathcal{U} | m \rangle = \langle p | e^{-i\mathcal{H}t} | m \rangle = \langle p | e^{-i\mathcal{H}t} \sum_n | n \rangle \langle n | m \rangle, \\ &= \sum_n \langle p | e^{-i\mathcal{H}t} | n \rangle \langle n | m \rangle, \text{ onde } | n \rangle \text{ são autoestados de } \mathcal{H}, \text{ i.e., } \mathcal{H} | n \rangle = E_n | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n t} \langle p | n \rangle \langle n | m \rangle = \sum_n e^{-iE_n t} v_{p,n} v_{n,m} \equiv \sum_n a_n e^{-iE_n t} = A e^{i\theta} \end{aligned}$$

onde  $A = A(m, p; t)$ ,  $\theta = \theta(m, p; t)$  e  $a_k = a_k(m, p)$ .

Embora a equação anterior descreva uma evolução temporal determinística, a soma nela contida pode ser considerada efetivamente como aleatória. Em outras palavras, mesmo que a evolução temporal seja regida por equações determinísticas, o comportamento das quantidades físicas observadas, como a amplitude de transição ou a fase, pode manifestar um comportamento estatístico semelhante a um processo aleatório. Isso significa que essas quantidades podem ser tratadas como se fossem aleatórias devido às características estatísticas que emergem durante a evolução do sistema.

À medida que o estado evolui ao longo do tempo, a fase  $E_n t$ , onde  $E_n$  é o autovalor correspondente ao estado medido, varia uniformemente dentro do intervalo  $[0, 2\pi[$  devido à natureza periódica das funções trigonométricas. Essa descrição é válida se a evolução for truncada em um passo de tempo  $\Delta t \gg J^{-1}$ , ou seja, para passo no tempo consideravelmente grandes. Nesse caso, o comportamento das fases pode ser aproximado por um processo aleatório<sup>1</sup>.

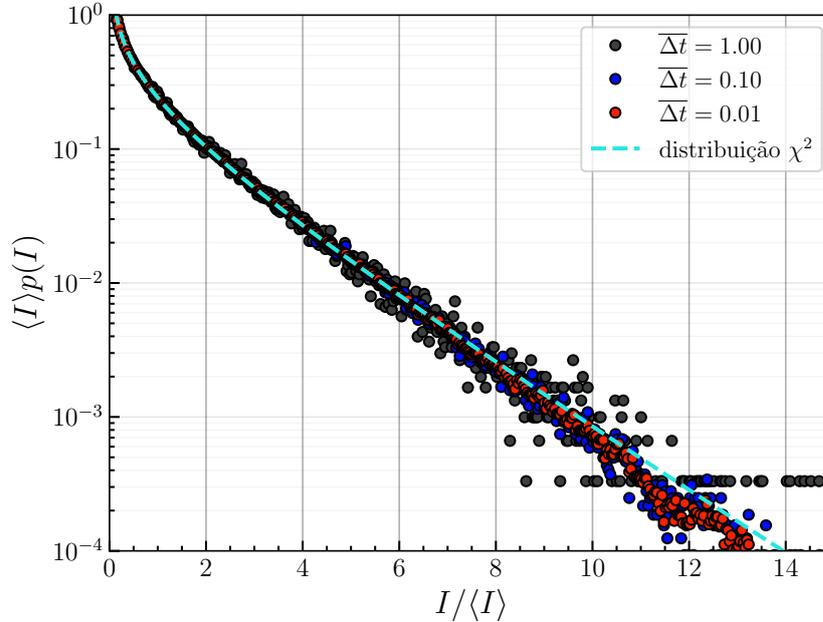
Quando o passo no tempo é pequeno, pode ocorrer que o comportamento estatístico das amplitudes não reflita completamente a natureza estocástica do sistema, como mostrado na Figura 5.2, onde apresentamos o padrão de speckle para uma rede unidimensional cristalina em diferentes passos no tempo. É importante ressaltar que, ao realizar a

<sup>1</sup>Isso pode ser interpretado também como uma aproximação estocástica.

evolução temporal do sistema através da expansão em série de Taylor do operador evolução temporal, estamos adotando uma abordagem recursiva. Assim, reescrevemos  $\Delta t \gg J^{-1}$  como  $1/\Delta t \ll J \rightarrow \overline{\Delta t} \ll J$ . Diferentemente da referência [107], onde a evolução do sistema é feita diretamente através do operador evolução temporal, neste caso, utilizamos  $\Delta t \gg J^{-1}$ . Isso implica que estamos considerando pontos muito espaçados na evolução do sistema, de modo que os pontos na evolução possam ser tratados como aleatoriamente independentes.

A figura 5.2 apresenta três casos que exemplificam o regime adotado. Podemos observar que a distribuição que melhor se ajusta é a distribuição chi-quadrado (que será explicada com mais detalhes posteriormente) quando  $\Delta t = 100$ , ou seja, correspondendo à curva vermelha. Assim, quando  $\Delta t \sim J^{-1}$ , o comportamento das amplitudes pode não refletir completamente o comportamento estatístico do sistema.

Figura 5.2: Padrão de speckle para três valores de  $\overline{\Delta t}$  diferentes, para uma rede cristalina usando.

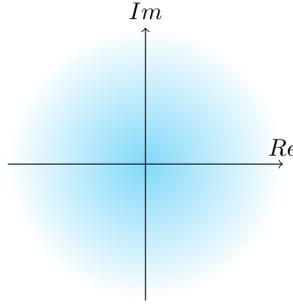


Fonte: Autor 2024.

Como discutido no capítulo 3, quando a desordem é fraca, significa que o comprimento de localização é grande, torna-se razoável assumir que  $a_n \sim 1/N$  nesse cenário. Além disso, temo que devido a desordem as auto-energias iram flutuar de tal forma que teremos uma distribuição de energia aleatória. Se permitirmos que o estado evolua por um tempo suficientemente longo, podemos aplicar o teorema do limite central. Dessa forma, a parte real e a parte imaginária de  $f_m^p$ , conforme ilustrado na Figura 5.3, atingem assintoticamente estatísticas gaussianas circulares centradas na origem, uma vez que temos condições semelhantes as apresentadas no capítulo 2.

Portanto, dado que a parte real e imaginária de  $f_m^p$  atingem estatísticas gaussianas circulares, podemos inferir que a amplitude  $A$  (onde  $A = |f_m^p|$ ) seguirá a distribuição de Rayleigh:

Figura 5.3: Ilustração da distribuição gaussiana circular.



Fonte: Autor 2024.

$$p_A = \frac{A}{\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{A^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (5.2)$$

para  $\theta$  temos o mesmo resultado mostrado no capítulo 2, onde  $\theta$  é distribuído uniformemente por todo o círculo. Portanto a intensidade,  $I = A^2$ , segue uma distribuição exponencial:

$$p_I(I) = p_A(\sqrt{I}) \left| \frac{dA}{dI} \right| = s^{-1} e^{-I/s} = \exp(s), \quad (5.3)$$

com intensidade média  $\langle I \rangle = s = 2\sigma^2$ . A Estrutura estatística acima é válida para uma única amostra de desordem e é contraída sobre uma evolução temporal truncado da função de onda em um tempo muito longo.

No caso de uma rede cristalina, conforme discutido no Capítulo 3, o sistema exibe um forte grau de simetria. Para este cenário, mostramos no Apêndice A, a seguinte relação que encontramos:

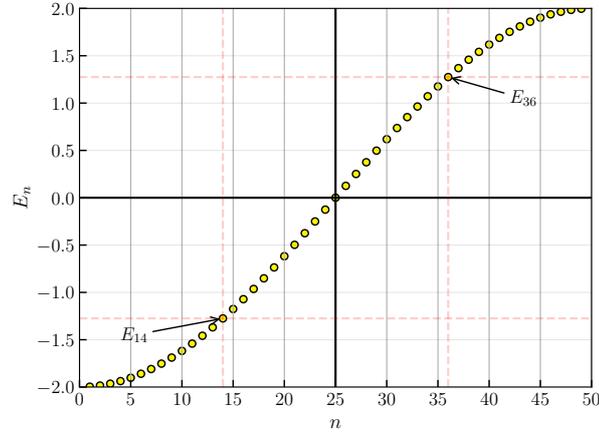
$$E_n = -2J \cos(n\pi/(N+1)).$$

A partir dessa expressão, podemos observar uma relação específica entre as autoenergias em relação ao centro da rede. Tomando  $N = 50$  como exemplo, na Figura 5.4, onde apresentamos as autoenergias em função dos sítios da rede, observamos padrões interessantes. Por exemplo, notamos que a energia  $E_{36}$  é igual a  $-E_{14}$ , como destacado na figura 5.4, dessa forma temos o seguinte padrão o autovalor correspondente ao primeiro sítio da rede é igual ao negativo do autovalor do último sítio da rede, o segundo é igual a menos o penúltimo. Essa simetria se mantém para outros pares de sítios, como evidenciado no gráfico. Assim, podemos generalizar essa relação, escrevendo que  $E_n = -E_{N-(N-1)}$ .

De maneira análoga, é natural esperarmos padrões semelhantes para as amplitudes  $a_n$ . Na Figura 5.5, apresentamos as amplitudes  $a_n(m, p)$  em função dos sítios da rede para diferentes combinações de  $m$  e  $p$ . Ao analisarmos em relação ao centro da rede, dividindo-a em duas regiões (vermelha e branca), observamos comportamentos distintos.

Para a combinação  $m = 1$  e  $p = 2$ , conforme mostrado na Figura 5.5a), notamos que a amplitude na região branca é igual ao negativo das amplitudes na região vermelha,

Figura 5.4: Autoenergia em relação ao sítios da rede para uma rede com  $N = 50$  e sem desordem.

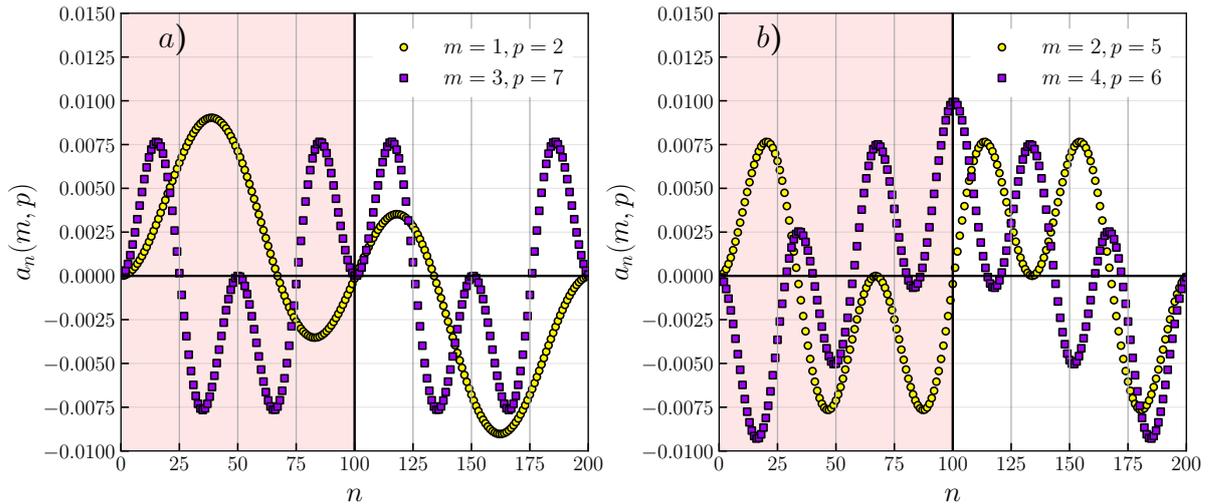


Fonte: Autor 2024.

seguindo uma relação semelhante ao caso das energias:  $a_n(m, p) = -a_{N-(n-1)}(m, p)$ . Isso ocorre para  $m$  ímpar e  $p$  par. No entanto, para  $m = 3$  e  $p = 7$ , os pontos na região vermelha são iguais aos pontos da região branca, permitindo-nos escrever  $a_n(m, p) = a_{N-(n-1)}(m, p)$ . Essa relação é válida para  $m$  e  $p$  ímpares.

Na Figura 5.5**b**), agora para  $m$  par e  $p$  ímpar, bem como para  $m$  e  $p$  pares. Observamos, respectivamente, que  $a_n(m, p) = -a_{N-(n-1)}(m, p)$  e  $a_n(m, p) = a_{N-(n-1)}(m, p)$ . Assim, concluímos que as amplitudes seguem a seguinte relação  $a_n(m, p) = \pm a_{N-(n-1)}(m, p)$ , dependendo das escolhas de  $m$  e  $p$ .

Figura 5.5: Amplitude de transição em diferentes sítios para uma rede com  $N = 100$  e sem desordem.



Fonte: Autor 2024.

Dessa forma, ao observarmos as partes real e imaginária de  $f_m^p$ , podemos reescrevê-las devido à simetria da rede da seguinte maneira:

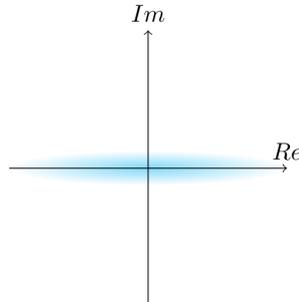
$$\begin{aligned}
\bullet \operatorname{Im}\{f_m^p\} &= - \sum_{n=1}^N a_n \operatorname{sen}(E_n t), \\
&= - \left\{ \sum_{n=1}^{N/2} a_n \operatorname{sen}(E_n t) + \sum_{n=N/2}^N a_{N-(n-1)} \operatorname{sen}(-E_{N-(n-1)} t) \right\}, \text{ como } E_n = -E_{N-(n-1)}, \\
&= - \left\{ \sum_{n=1}^{N/2} a_n \operatorname{sen}(E_n t) + \sum_{n=N/2}^N a_{N-(n-1)} \operatorname{sen}(E_n t) \right\}, \text{ uma vez que } \operatorname{sen}(-x) = -\operatorname{sen}(x), \\
&= - \left\{ \sum_{n=1}^{N/2} a_n \operatorname{sen}(E_n t) - \sum_{n=N/2}^N a_{N-(n-1)} \operatorname{sen}(E_n t) \right\},
\end{aligned}$$

da mesma forma,

$$\begin{aligned}
\bullet \operatorname{Re}\{f_m^p\} &= - \sum_{n=1}^N a_n \cos(E_n t), \\
&= - \left\{ \sum_{n=1}^{N/2} a_n \cos(E_n t) + \sum_{n=N/2}^N a_{N-(n-1)} \cos(-E_{N-(n-1)} t) \right\}, \\
&= - \left\{ \sum_{n=1}^{N/2} a_n \cos(E_n t) + \sum_{n=N/2}^N a_{N-(n-1)} \cos(E_n t) \right\}, \\
&= - \left\{ \sum_{n=1}^{N/2} a_n \cos(E_n t) + \sum_{n=N/2}^N a_{N-(n-1)} \cos(E_n t) \right\},
\end{aligned}$$

com isso temos que se  $a_n = +a_{N-(n-1)}$ , então  $A = |f_m^p| = |\operatorname{Re}\{f_m^p\}|$  já se  $a_n = -a_{N-(n-1)}$  temos  $A = |f_m^p| = |\operatorname{Im}\{f_m^p\}|$ .

Figura 5.6: Ilustração da distribuição semi-normal.



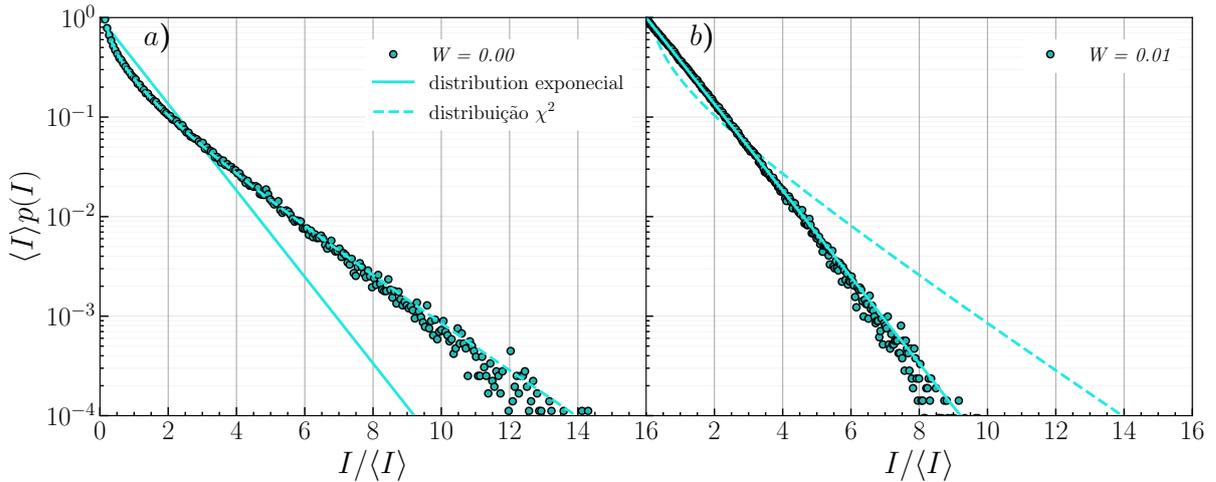
Fonte: Autor 2024.

Dessa forma, para simplificar, considerando  $A = |\operatorname{Re}\{f_m^p\}|$ , obtemos uma distribuição semi-normal, conforme ilustrado na Figura 5.6. Podemos expressar a densidade de probabilidade como:

$$\begin{aligned}
 p_A(A) &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{A^2}{\sigma^2}\right\}, \\
 \Rightarrow p_I(I) &= p_A(\sqrt{I}) \left|\frac{dA}{dI}\right|, \\
 &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{I}{\sigma^2}\right)\right\} \frac{1}{2\sqrt{I}}, \text{ tomando } x = I/\sigma^2, \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi x}} e^{-x/2} \frac{1}{2\sigma^2}. \tag{5.4}
 \end{aligned}$$

Assim, nesse caso, a distribuição de intensidade segue uma distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade.

Figura 5.7: Distribuição de speckle para uma rede *a)* cristalina e *b)* fracamente desordenada ( $W = 0.01$ ), em ambos os casos iniciamos a o pacote da função de onda no sitio 50 e medimos no sitio 53, considerando uma rede com  $N = 100$ , realizando a evolução até o tempo  $10^5 J^{-1}$ . Curva solida representa a distribuição exponencial [eq. 5.3] e a curva tracejada a distribuição chi-quadrada [eq. 5.4].



Fonte: Autor 2024.

Na Figura 5.7, mostramos as distribuições de speckles, representadas por círculos ciano, para dois casos discutidos anteriormente: cristalino e desordenado. Para obter essas distribuições, usamos uma equação de recorrência encontrada no Capítulo 3, que é:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_n(t) = -\epsilon_n \psi_n - J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}).$$

Resolvemos numericamente esta equação usando uma expansão em série de Taylor do operador evolução temporal em FORTRAN, conforme expresso na Equação 4.21. Assim, a função de onda em um intervalo de tempo  $\overline{\Delta t}$  é dada por  $|\psi(\overline{\Delta t})\rangle = \Gamma(\overline{\Delta t})|\psi(t=0)\rangle$ . Usamos esse método de forma recursiva para obter a função de onda no tempo  $t$ . Fixamos  $l = 20$  e  $\overline{\Delta t} = 0.1$  para todas as distribuições analisadas a partir deste ponto, que foram

suficientes para conservar a norma da função de onda em todo o intervalo de tempo, com precisão  $|1 - |\psi(t)|^2| < 10^{-9}$ .

A condição inicial do sistema é uma condição tipo delta,  $|\psi(t=0)\rangle = |p_0\rangle$ , com  $p_0 = 50$ . Evoluímos o sistema por um tempo suficientemente longo para poder fazer o tratamento estatístico das amplitudes de transição entre os sítios  $p_0$  e  $m = 53$ . Nesse contexto, observamos que a distribuição de intensidade para o caso desordenado segue uma distribuição exponencial (Figura 5.7a)), enquanto a distribuição associada ao caso cristalino segue a distribuição qui-quadrado (Figura 5.7b)), como discutido anteriormente em ambos os casos.

Agora que visualizamos a evolução quântica de uma partícula como um processo aleatório no tempo, vamos estender essa perspectiva para um sistema de duas partículas, conforme discutido no Capítulo 4. Dividiremos nossos resultados em três partes: primeiro, trataremos do caso em que as partículas não interagem, ou seja,  $U = 0$ ; em seguida, abordaremos o caso com interação; e, por fim, observaremos o comportamento na banda de estados ligados.

## 5.2 Partículas não interagentes

Vamos abordar inicialmente o caso em que as partículas não interagem. Começaremos preparando as partículas nos sítios  $(m, n)$  (vamos chamar esse estado de "estado de entrada") e mediremos a amplitude de transição para os sítios  $(p, q)$  (vamos chamar esses de "estados de saída"). Como mencionado anteriormente, consideraremos que a rede possui condições periódicas de contorno e é fracamente desordenada. Nesse cenário, podemos expressar a amplitude de transição como<sup>2</sup>:

$$h_{m,n}^{p,q} = f_m^p f_n^q = A_1 A_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}. \quad (5.5)$$

Dado que as partículas não interagem entre si, cada uma se propaga pela rede de forma independente. Assim, podemos escrever a amplitude de transição,  $h_{m,n}^{p,q}$ , como um produto das amplitudes de cada uma das partículas.

Como discutido na seção anterior, o speckle de uma única partícula em uma rede fracamente desordenada segue uma distribuição exponencial. Como as duas partículas não sentem a presença uma da outra, temos que  $I_i = A_i^2 \sim \text{Exp}(s_i)$ .

Se  $I_1$  e  $I_2$  forem variáveis aleatoriamente independentes, é possível mostrar que o produto  $I = I_1 I_2$  segue a distribuição  $\mathcal{K}$ , onde<sup>3</sup>:

$$\mathcal{K}(I; \mu, \nu) = \frac{2\nu}{\mu\Gamma(\nu)} \left( \sqrt{\frac{I}{\mu}} \right)^{\nu-1} K_{\nu-1} \left( 2\sqrt{\frac{I}{\mu}} \right) \quad (5.6)$$

<sup>2</sup>A intensidade correspondente é análoga a função correlação para duas partículas  $\langle a_m^\dagger b_n^\dagger a_n b_m \rangle$ , conhecida como correlação Hanbury Brown-Twiss na óptica [4, 5, 8, 10]

<sup>3</sup>Distribuições  $\mathcal{K}$  generalizadas resultam do produto de duas distribuições gama independentes, que têm a distribuição exponencial como caso particular.

onde  $K_\nu(\bullet)$  é a função de Bessel modificada de ordem  $\nu$  do segundo tipo e  $\mu = s_1 s_2$ . Para esta distribuição, é conhecido que o contraste pode ser escrito como:

$$\mathcal{C}(\nu) = \sqrt{\frac{\nu + 2}{\nu}}. \quad (5.7)$$

Portanto, a distribuição de intensidade para partículas distinguíveis segue uma distribuição  $\mathcal{K}$  com  $\nu = 1$ , como pode ser observado na Figura 5.8, uma vez que a amplitude de transição das duas partículas pode ser escrita como um produto de cada uma individualmente, e ambas seguem uma distribuição exponencial. Essas distribuições  $\mathcal{K}$  surgem sempre que se sabe que alguma intensidade obedece à estatística exponencial, mas há uma incerteza sobre a sua média.<sup>4</sup>

O caráter de cauda longa dos padrões de speckle para duas partículas distinguíveis não interagentes surge das correlações presentes no hamiltoniano das duas partículas. Quando  $U = 0$ , o hamiltoniano pode ser expresso de forma diagonal como:

$$\mathcal{H} = \sum_{n_1, n_2}^N E_{n_1, n_2} b_{n_2}^\dagger a_{n_1}^\dagger |0, 0\rangle \langle 0, 0| a_{n_1} b_{n_2}, \quad (5.8)$$

onde  $|0, 0\rangle$  é o estado de vácuo e  $E_{n_1, n_2} = E_{n_1} + E_{n_2}$ .

Assim as  $N^2$  fases,  $E_{n_1, n_2} t$  são combinações de dois conjuntos idênticos de  $N$  estados quânticos disponíveis para cada um das partículas.

No entanto, nem sempre  $I_1$  e  $I_2$  serão independentes (para a maioria dos pares de entrada  $(m, n)$  e saída  $(p, q)$ , isso é verdade). Por exemplo, se medirmos a amplitude de transição na banda de estados ligados, isto é,  $m = n$  e  $p = q$ , as amplitudes se tornam totalmente correlacionadas ( $I_1 = I_2$ ). Nesse caso,  $|h_{m,m}^{p,p}| = |f_m^p|^2 \sim \text{Exp}(s)$ , e a intensidade  $I = |f_m^p|^4$  segue a distribuição Weibull:

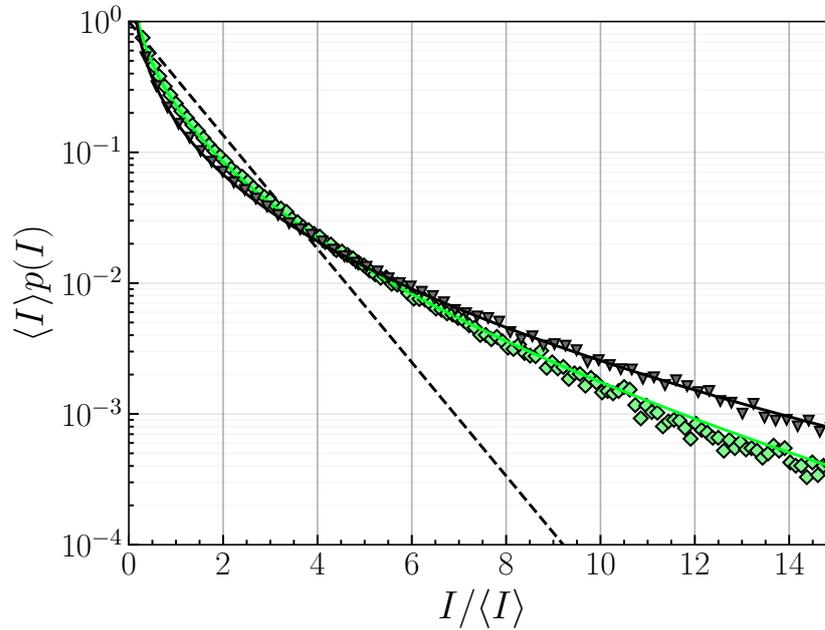
$$p_I(y) = \alpha^{-1} (2y)^{-1/2} e^{-\sqrt{2y}}, \quad (5.9)$$

com  $y = I/\alpha$  e  $\alpha = 2s^2$ . Essa distribuição é representada pela curva sólida preta na Figura 5.8, com o contraste  $\mathcal{C} = \sqrt{5} \approx 2,24$ . Observamos que o padrão de speckle gerado pela medição da intensidade na banda de estados ligados, representado pelos triângulos cinza, segue a distribuição Weibull.

Com base no mapeamento bidimensional realizado no Capítulo 4, os padrões de speckle com maiores contrastes são consequência de correlações estruturais. Em outras palavras, a disposição espacial das partículas influencia a formação de padrões de speckle com contrastes mais acentuados. Assim, a região do espaço onde as partículas estão fortemente correlacionadas corresponde à diagonal no espaço de Hilbert ( $m = n$ ). No entanto, veremos em breve que essas correlações são parcialmente destruídas quando  $U \neq 0$ .

<sup>4</sup>Vale destacar que as distribuições  $\mathcal{K}$  surgem sempre que se sabe que alguma intensidade obedece à estatística exponencial, mas há uma incerteza sobre a sua média [21, 114].

Figura 5.8: Funções de densidade de probabilidade escalonadas de intensidades de duas partículas para uma única amostra desordenada com o tamanho da rede  $N = 40$  sítios e  $W = 0,01J$ . As estatísticas são feitas usando a relação de recorrência apresentada no capítulo 4 para o sistema de duas partículas, onde resolvemos de forma recursiva essa relação de recorrência usando a expansão em série de Taylor do operador evolução temporal, da mesma forma descrita no caso de uma única partícula, onde usamos  $\overline{\Delta t} = 0.01$ . Nesse caso, as partículas não interagem ( $U = 0$ ), preparamos as duas partículas no sítio  $(m, n) = (20, 22)$  e a intensidade  $I = |h_{m,n}^{p,q}|^2$  é medida nos sítios  $(p, q) = (23, 26)$ . Para o caso distinguível, é mostrado pelas diamantes verdes, sendo a curva sólida verde a função distribuição  $\mathcal{K}$  com parâmetro  $\nu = 1$  e contraste  $\mathcal{C} = \sqrt{3}$ . Os triângulos cinza representam a transição entre a banda de estados ligados,  $I = |h_{m,m}^{p,p}|^2$ , com  $m = 20$  e  $p = 22$ . A curva sólida preta representa a distribuição Weibull ( $\mathcal{C} = \sqrt{5}$ ). Para referência, a distribuição exponencial é mostrada pela curva tracejada.



Fonte: Autor 2024.

Vamos agora explorar o padrão de speckle para o caso em que temos bósons idênticos e férmions sem spin. Como discutido no Capítulo 4, cada conjunto pode ser acessado injetando dois feixes coerentes em locais  $(m, n)$  e  $(n, m)$  com relações de fase simétrica ou antissimétrica adequadas.

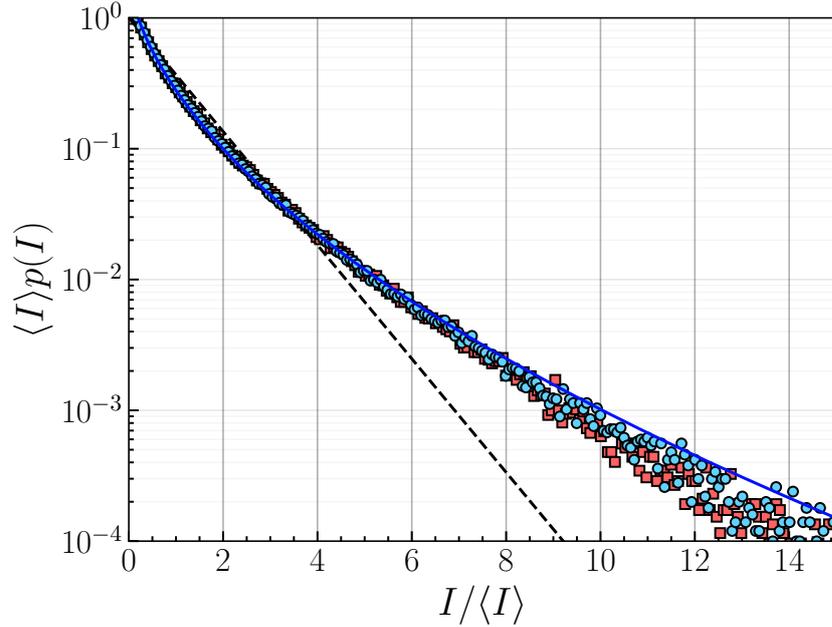
Assim, consideramos o caso bosônico e fermiônico, e escrevemos a condição inicial como:

$$\begin{cases} h_{m,n(B)} = (f_m^p f_n^q + f_m^q f_n^p) \mathcal{N} & , \text{ para bósons} \\ h_{m,n(F)} = (f_m^p f_n^q - f_m^q f_n^p) & , \text{ para férmions} \end{cases} \quad (5.10)$$

com  $\mathcal{N} = 2^{-(\delta_{m,n} + \delta_{p,q})/2}$ . Assim, os padrões de speckle para os casos bosônicos e fermiônicos, representados na Figura 5.9, mostram que a distribuição de intensidade segue a distribuição  $\mathcal{K}$  com  $\nu = 2$  e contraste  $\mathcal{C} \approx \sqrt{2} \approx 1.41$ . Nos dois cenários, há interferência

entre speckles distribuídos de acordo com a distribuição  $\mathcal{K}$ , o que é esperado devido à natureza emaranhada dos estados de entrada, que podem levar a correlações não clássicas entre as partículas.

Figura 5.9: Sob as mesmas condições da figura anterior (figura 5.8). Quando ambas as partículas são bósons ou férmions idênticos com simetria adequada, temos  $I = |h_{m,n(B)}^{pq}|^2$  e  $I = |h_{m,n(F)}^{pq}|^2$ , respectivamente (quadrados vermelhos e círculos azuis). Para ambos os casos, obtemos outra distribuição  $\mathcal{K}$  com parâmetro de forma  $\nu = 2$  como consequência do emaranhamento devido à simetrização da função de onda.



Fonte: Autor 2024.

Na verdade, as correlações quânticas se manifestam nas estatísticas de speckle, resultando em flutuações mais fracas do que aquelas observadas para partículas distinguíveis. Para entender melhor isso, excluindo os estados ligados, consideremos:

$$f_m^p f_n^q \pm f_m^q f_n^p = A_1 e^{i\theta_1} + A_2 e^{i\theta_2}, \quad (5.11)$$

que é uma soma fasorial de duas componentes com amplitudes independentes seguindo uma distribuição  $\mathcal{K}$ , isto é,  $A_i \sim 2\sqrt{I_i} \mathcal{K}(\sqrt{I_i}; \mu, 1)$  com  $\langle A_i \rangle = \pi\sqrt{\mu}/4$  e fase  $\theta_i$  distribuída uniformemente. Aqui, assumimos uma média comum para ambas as variáveis. O speckle pode ser avaliado por meio de uma versão modificada da fórmula de Klyver-Person<sup>5</sup>, resultando em outra distribuição  $\mathcal{K}$ , agora com parâmetro  $\nu = 2$  e média  $\mu' = 2\mu$ , ou seja,  $p_I(I) = \mathcal{K}(I; \mu', 2)$ .

Assim, o contraste é  $\mathcal{C} = \sqrt{2} \approx 1.41$ , inferior ao obtido para partículas distinguíveis ( $\mathcal{C} = \sqrt{3}$ ). Para ilustrar isso, no caso de partículas distinguíveis, as correlações quânti-

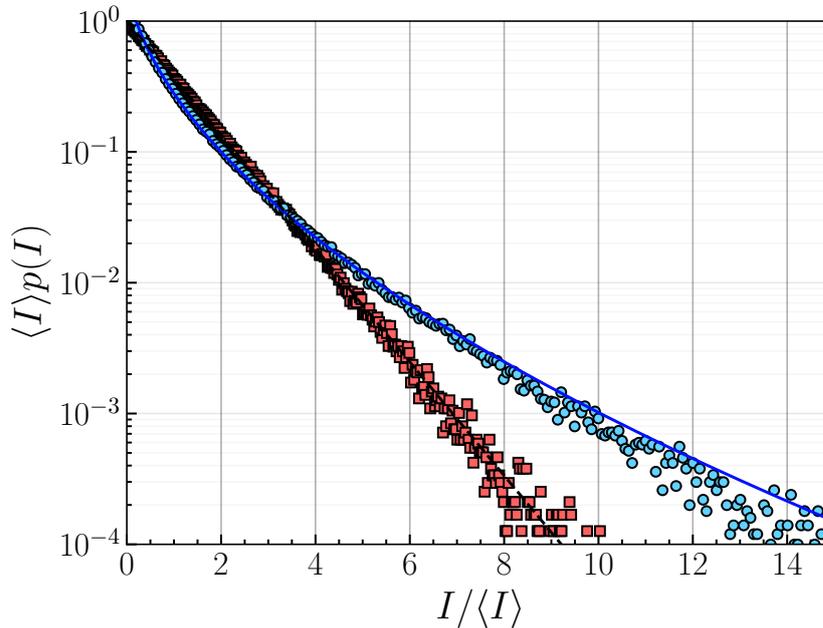
<sup>5</sup>A fórmula de Klyver-Pearson dá a distribuição de intensidade para um número finito de fasores de igual amplitude. Se estas amplitudes forem aleatórias e obedecerem a uma certa  $p_A(A)$ , é necessário avaliar a distribuição composta  $\int (I|A)p_A(A)dA$ , onde  $p(I|A)$  é a função de densidade de intensidade condicional dependente do conhecimento de  $A$  (ver Sec. 3.2.4 da Ref. [21] para mais pormenores)

cas são limitadas e os padrões de speckle são formados principalmente pela interferência clássica entre as ondas de cada partícula, resultando em padrões com contrastes mais acentuados. Por outro lado, no caso de partículas inicialmente emaranhadas, as correlações quânticas podem suprimir a interferência clássica entre as ondas de cada partícula, levando a uma redução no contraste.

### 5.3 Partículas interagentes

Agora vamos examinar como a interação local entre as duas partículas influencia a estatística de speckle. Quando  $U \neq 0$ , as amplitudes de transição entre os estados quânticos já não podem mais ser expressas unicamente em termos das funções de onda de uma única partícula. Inicialmente, vamos analisar a dinâmica nos subespaços bosônico e fermiônico, onde é importante notar que, dada a condição inicial simétrica ou antissimétrica, o sistema evoluirá independentemente em cada um desses subespaços, como discutido no Capítulo 4.

Figura 5.10: Sob as mesmas condições das figuras anteriores (figura 5.8 e 5.9), porém estamos considerando  $U = 1J$ , onde vemos que a distribuição referente aos férmions idênticos não sofre influência da interação, enquanto que os bósons se ajustam a distribuição exponencial.



Fonte: Autor 2024.

Para o caso bosônico, observamos que devido à presença da interação, ocorre uma quebra de simetria no espectro de energia<sup>6</sup>. Isso leva a uma mudança na estatística da

<sup>6</sup>A simetria que é quebrada é a simetria associada à descrição das transições entre estados quânticos das duas partículas. Inicialmente, quando a interação entre as partículas é nula ( $U = 0$ ), as transições entre os estados quânticos podem ser expressas em termos de funções de onda de partícula única, o que preserva a simetria do sistema. No entanto, quando há uma interação local entre as partículas

intensidade para um regime exponencial, como podemos ver na Figura 5.10. Por outro lado, o padrão de speckle correspondente ao subespaço fermiônico não é afetado pela interação, mantendo seu perfil dado pela distribuição  $\mathcal{K}$ . Isso é esperado, pois neste subespaço as partículas se comportam como férmions não interagentes.

Essencialmente, quando há interação entre as partículas, há uma quebra de simetria no sistema, resultando em uma alteração na estatística da intensidade dos padrões de speckle. Enquanto no subespaço fermiônico, onde as partículas agem como férmions não interagentes, a presença ou ausência de interação tem pouco impacto nos padrões de speckle observados.

Agora, vamos examinar as transições entre estados bosônicos em relação a  $U$ , que se aproximam muito da distribuição exponencial. Para isso, plotamos o contraste em função da interação em diferentes escalas de tempo, como mostrado na Figura 5.11. Podemos observar que, para  $U \ll J$ , a estatística exponencial só é obtida no regime de tempo longo. Isso ocorre porque o espectro bosônico, que inicialmente não possui interação, é ligeiramente alterado quando a interação é introduzida. Leva algum tempo até que a soma das amplitudes de transição convirja para um padrão de speckle completamente desenvolvido.

Quando  $U$  é fraco, tanto se os bósons estiverem ou não localizados no mesmo local (como veremos na próxima seção), no regime de tempo curto, observamos flutuações mais elevadas no contraste. Essas flutuações lembram o padrão de speckle associado à distribuição  $\mathcal{K}$ . Para valores intermediários de  $U$ , essa dinâmica transitória se torna menos pronunciada e o padrão de speckle rapidamente assume uma distribuição exponencial.

À medida que aumentamos  $U$ , como discutido no Capítulo 4, surge uma banda menor de  $N$  estados ligados ( $\mathcal{L}$ ), para além da banda de estados não ligados ( $\mathcal{NL}$ ) no espectro de energia, que consiste em  $N(N-1)/2$  estados [3, 8]. Assim, é conveniente expressar a amplitude de transição como a soma fasorial da seguinte forma:

$$h_{m,n(B)}^{p,q} = \sum_{k \in \mathcal{NL}} b_k e^{i\phi_k} + \sum_{k \in \mathcal{L}} b'_k e^{i\phi_k}, \quad (5.12)$$

Quando  $U \gg J$ , se ambos os bósons forem inicialmente colocados em locais diferentes, eles exibem correlações semelhantes a férmions, como o antibunching espacial<sup>7</sup> [8]. Isso ocorre porque quando as partículas estão relativamente distantes uma da outra, aumentar a interação resulta em um grande distanciamento energético entre as bandas de estados ligados e não ligados. Conseqüentemente, os estados que são responsáveis por correlacionar o movimento das duas partículas se tornam inacessíveis. Nesse cenário, a dinâmica dos dois bósons assemelha-se à dinâmica de dois férmions não interagentes sem spin. Essa semelhança é evidenciada pelo alto contraste em tempos curtos e intermediários no padrão de speckle (ver Figura 5.11).

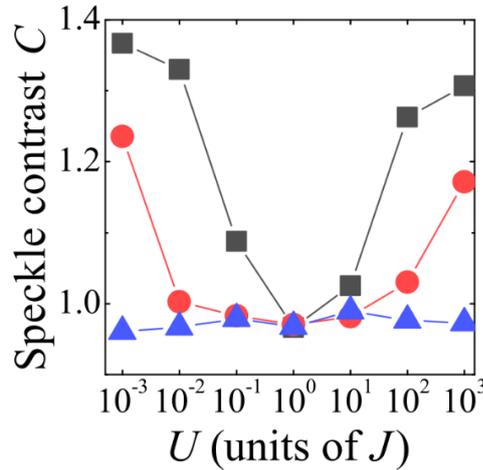
Embora as transições entre os estados ligados e não ligados permaneçam insignifi-

---

( $U \neq 0$ ), a simetria é perdida. Isso significa que a descrição das transições entre os estados quânticos de duas partículas não pode mais ser expressa apenas em termos de funções de onda de partícula única, indicando uma quebra na simetria do sistema.

<sup>7</sup>O antibunching espacial ocorre quando partículas evitam ocupar o mesmo estado simultaneamente [8]

Figura 5.11: Contraste do speckle bosônico  $\mathcal{C}$  contra em função da interação  $U$  numa rede com  $N = 26$  sítios e  $W = 0,01J$ . Para uma dada desordem, a estatística para  $I = |h_{m,n(B)}^{p,q}|^2$  é considerada em três regimes de tempo diferentes, curto ( $tJ \in [0, \Delta]$ ; *quadrados*), intermediário ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *circulos*), e longo ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *tringulos*), com  $\Delta = 10^5$ , e  $\bar{\Delta} = 0.01$ . As curvas de contraste são médias de 100 realizações independentes de desordem. Os dois bósons são carregados nos sítios (10, 11), com as medidas de intensidade sendo feitas em (13, 16).



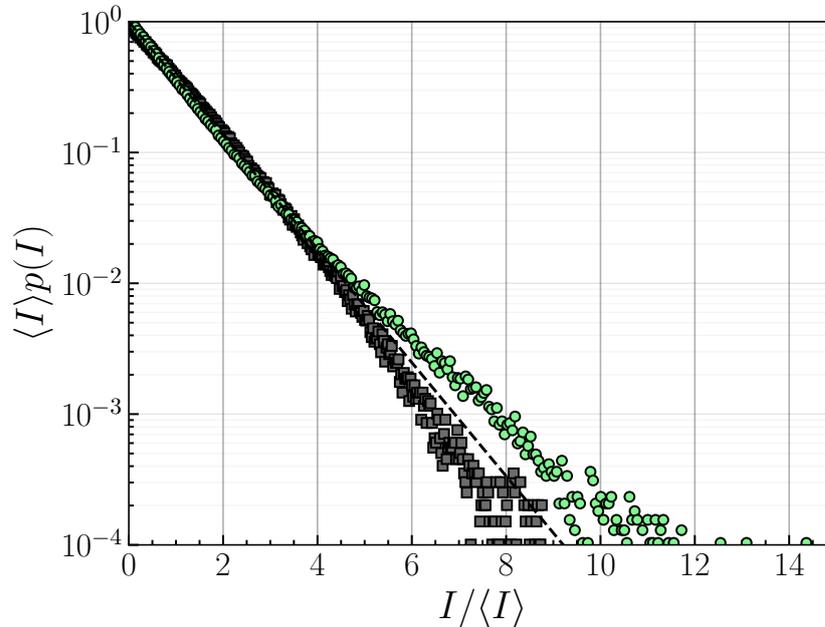
Fonte: Retirada da referência [107].

cantes, o speckle acabará se configurando como um speckle completamente desenvolvido ( $\mathcal{C} \approx 1$ ) em um regime de tempo muito longo. Esse processo de convergência para um padrão de speckle completamente desenvolvido envolve a combinação de múltiplos fatores, como a interação entre as partículas e a disposição espacial entre elas. Devido a esses fatores, leva um tempo para que as diferentes componentes se ajustem e produzam um padrão de speckle completamente desenvolvido. Vale ressaltar que a dinâmica de antibunching persiste indefinidamente. As relações de fase incorporadas na soma dos fasores correspondentes fazem com que o teorema do limite central seja válido, apesar da persistência do antibunching. Além disso, as relações de fase presentes na soma levam a um comportamento estatístico que se assemelha a uma distribuição normal.

Agora vamos observar o padrão de speckle para o caso de partículas distinguíveis em locais diferentes ( $m, n$ ) e o referente aos estados ligados,  $m = n$  e  $p = q$ , como mostrado na Figura 5.12. Inicialmente, para as partículas distinguíveis (representadas pela curva verde), o speckle resultante em ( $p, q$ ) surge como uma interferência entre os fasores distribuídos por *Rayleigh* e  $\mathcal{K}$ , componentes bosônicas e fermiônicas, respectivamente. Observamos que o speckle é quase exponencialmente distribuído, com exceção de uma cauda longa (o contraste aqui é numericamente encontrado em cerca de  $\mathcal{C} \approx 1,05$ ).

Nesse caso, as correlações fermiônicas associadas ao subespaço antissimétrico impedem a formação de um speckle completamente desenvolvido. Portanto, esse contraste  $\mathcal{C} > 1$  sempre será mantido no limite de tempo infinito para partículas distinguíveis, independentemente de  $U/J$ , no regime de desordem fraca  $W \ll J$ . Se a desordem for maior, o contraste do speckle seria menor devido ao surgimento de modos de Anderson fortemente localizados.

Figura 5.12: Sob as mesmas condições das figuras anteriores (figura 5.8 e 5.9), porém estamos considerando  $U = 1J$ , onde vemos que tanto o caso de partículas distinguíveis quanto o de estados ligados se aproximam da distribuição exponencial. As partículas distinguíveis (diamantes verdes) apresentam uma cauda alargada. Quando apenas os estados ligados (triângulos cinzentos) estão envolvidos, a cauda retrai-se.



Fonte: Autor 2024.

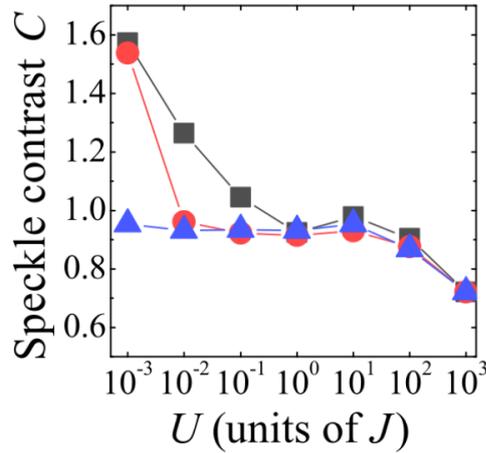
Ao observar a distribuição cinza associada aos estados ligados, conforme mostrado na Figura 5.12, notamos que sua cauda se retrai. Isso sinaliza o início dos modos com comprimento de localização mais curto. A seguir, discutiremos um cenário referente aos estados ligados no regime de  $U/J$  grande.

## 5.4 Banda de estados ligados e estatística sub-Rayleigh

Agora vamos analisar o comportamento dos estados ligados em um regime de interação forte. Como observado no gráfico anterior, Figura 5.12, podemos notar uma retração da cauda já para  $U$  intermediário. No entanto, à medida que aumentamos a interação, há uma diminuição do contraste, conforme mostrado na Figura 5.13. Isso ocorre quando tanto a condição inicial do sistema quanto o estado de medição envolvem os estados ligados. Isso é diferente do que observamos para o caso bosônico, onde os estados de entrada e saída não incluíam os estados ligados.

Isso ocorre devido à diminuição das energias acessíveis na banda de estados ligados e ao distanciamento energético entre a banda de estados ligados e não ligados. Essa condição promove uma assimetria na soma fasorial relacionada apenas aos estados ligados. Ao contrário do caso bosônico, nossa soma fasorial é constituída apenas pelo somatório dos estados ligados na equação 5.12. Na dinâmica de duas partículas interagentes, em um regime de interação forte e para a condição inicial sendo um pacote tipo delta, a dinâmica

Figura 5.13: Contraste do speckle bosônico  $\mathcal{C}$  contra em função da interação  $U$  numa rede com  $N = 26$  sítios e  $W = 0,01J$ . Para uma dada desordem, a estatística para  $I = |h_{m,n(B)}^{p,q}|^2$  é considerada em três regimes de tempo diferentes, curto ( $tJ \in [0, \Delta]$ ; *quadrados*), intermediário ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *circulos*), e longo ( $tJ \in [10^6, 10^6 + \Delta]$ ; *tringulos*), com  $\Delta = 10^5$ , e  $\bar{\Delta} = 0.01$ . As curvas de contraste são médias de 100 realizações independentes de desordem. Caso referente aos estados ligados, com os dois bósons colocados em (10,10) e medidos em (11,11).



Fonte: Retirada da referência [107].

do sistema ocorre predominantemente na banda de estados ligados [101]. Isso significa que as partículas estão fortemente correlacionadas e não acessam a banda de estados não ligados. Conforme aumentamos a interação no sistema, o intervalo de energias acessíveis diminui, levando a uma diminuição da distância entre elas. Isso resulta em uma assimetria na soma fasorial, onde um ou mais fasores se destacam em relação aos demais. Os fasores menos destacados seguem uma distribuição exponencial com média  $s_n$ .

No caso mais simples, em que temos apenas um fasor dominante com intensidade  $I_0$ , a intensidade segue uma distribuição Rician (vista no capítulo 2), dada por:

$$\mathcal{R}(I; r) = s_n^{-1} e^{-(r+I/s_n)} I_0(2\sqrt{Ir/s_n}), \quad (5.13)$$

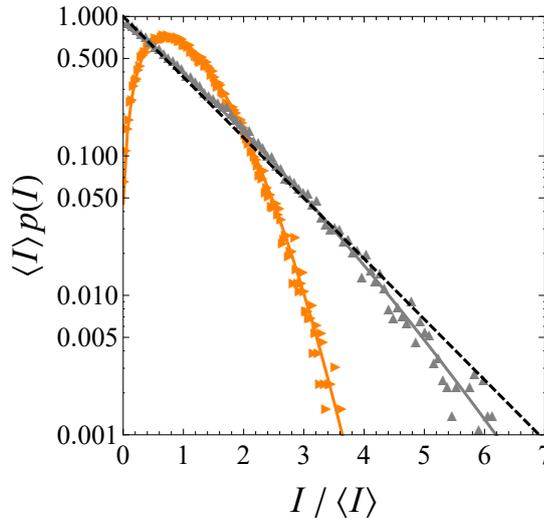
onde  $I_0(\cdot)$  é a função de Bessel modificada do primeiro tipo de ordem zero e  $r = I_0/s_n$ . O contraste nesse caso é  $\mathcal{C} = \sqrt{1+2r}/(1+r)$ . Entretanto, se temos mais de um fasor dominante, podemos generalizar essa distribuição sobre diferentes  $r$ , fazendo a seguinte integral:

$$p_I(I) = \int \mathcal{R}(I|r)g(r)dr, \quad (5.14)$$

onde  $\mathcal{R}(I|r)$  é a distribuição Rician condicional ao conhecimento de  $r$  e  $g(r)$  é a função densidade de probabilidade. Essa forma generalizada da distribuição Rician apresenta um contraste menor que um. Em última análise, depende de  $U$ , bem como da distância entre os locais de entrada e saída, dado o perfil típico dos modos localizados, lembrando que existe uma relação não monotônica entre  $U$  e o grau de localização de Anderson. Ou

seja, se tal distância for suficientemente grande, esperamos que  $g(r) \sim \text{Exp}(s_0)$ , e então a Rician composta se transforma em uma distribuição exponencial com média  $I = s_n + s_0$ .

Figura 5.14: Funções de densidade de probabilidade escalonadas associadas a transições bosônicas de estado ligado. Aqui,  $I = |h_{m,n}^{p,q}|$  com  $m = 20$  e  $p = 22$  considerando uma cadeia com  $N = 40$  sítios no regime  $U$  forte. As estatísticas são obtidas em uma única amostra de desordem com  $W = 0,01J$  evoluindo até o tempo  $tJ = 10^7$  em passos de 100. Triângulos acima (à direita) representam o caso para  $U = 200J$  ( $U = 500J$ ). Curvas sólidas são os ajustes Ricianos compostos obtidos isolando as quatro maiores amplitudes da soma fasorial aleatória correspondente para construir  $g(r)$ . A distribuição exponencial é exibida como uma curva tracejada para referência.



Fonte: Retirada da referência [107].

Para ilustrar a distribuição Rician composta em ação, direcionamos nosso foco para o regime de  $U$  forte. A figura 5.14 confirma as estatísticas previstas para a amplitude de transição envolvendo os estados ligados. Avaliamos numericamente a integral  $\int \mathcal{R}(I|r)g(r)dr$ , onde a diferença entre cada distribuição ocorre, pois  $g(r)$  depende tanto de  $U$  quanto da distância entre os estados de entrada e saída. Quando a distribuição se aproxima de uma distribuição exponencial, a distribuição Rician padrão com apenas um fador dominante (com  $g(r)$  sendo uma função delta de Dirac) deve ser suficiente. As estatísticas sub-Rayleigh podem, assim, ser obtidas para partículas com forte interação em um meio fracamente desordenado.

# Capítulo 6

## Conclusão

Neste trabalho, apresentamos o estudo do speckle de duas partículas. Analisamos diferentes cenários que envolvem partículas distinguíveis e idênticas, e também consideramos se há interação entre elas ou não. Inicialmente, revisamos alguns resultados já presentes na literatura para fundamentar nossa descrição do fenômeno do speckle em sistemas de partículas interagentes. Além disso, é importante mencionar que nosso trabalho foi reconhecido com o Prêmio de Excelência Acadêmica da FAPEAL (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Alagoas), conforme o Edital Fapeal nº 03/2023 – Prêmio de Excelência Acadêmica, e foi publicado no *PHYSICAL REVIEW A* em 16 de agosto de 2023[107].

Observamos que as flutuações associadas a esse fenômeno podem revelar sutis correlações quânticas entre as partículas. É possível extrair padrões não-Rayleigh da evolução temporal dessas partículas, que variam desde formas de baixo contraste obedecendo a distribuições Rician compostas até padrões distribuídos por  $K$ , que apresentam flutuações superiores às exponenciais. A dinâmica de duas partículas pode ser prontamente adaptada a um conjunto de guias de ondas fotônicos quadradas carregadas com luz clássica [6, 7, 9, 11, 20]. Os diferentes padrões de speckles são então obtidos através da definição da relação de fase de entrada desejada (de modo a ativar o comportamento bosônico e/ou fermiônico) e do controle da dessintonia entre os guias de onda diagonais e os outros [20].

Nossos resultados não apenas têm aplicações diretas na óptica, mas também se estendem à caracterização de sistemas quânticos de forma geral. Demonstramos que medições locais na base computacional são capazes de capturar correlações quânticas sutis envolvendo partículas idênticas. Mesmo quando as partículas são distinguíveis, a distribuição de speckle resultante exibe um contraste  $\mathcal{C} > 1$ , uma propriedade que pode ser atribuída a correlações fermiônicas. Os padrões de speckle correspondentes a duas partículas bosônicas também apresentam um contraste maior tanto nos limites de interação fraca quanto forte. É necessário um tempo transitório antes que suas correlações intrínsecas se dissipem, resultando no surgimento de um speckle totalmente desenvolvido. Essa característica intrigante permite a manipulação das estatísticas de speckle mantendo o padrão dinâmico geral[29], demonstrando mais uma manifestação de emaranhamento decorrente da identidade das partículas com implicações práticas[115].

Mencionamos que estudos relacionados envolvendo estatísticas de speckle de dois

---

fótons como uma sonda de emaranhamento podem ser encontrados nas Refs. [108, 116]. Trabalhos futuros podem aprofundar a resposta speckle no nível multipartícula [117, 118] e sua relação com outras formas de emaranhamento.

# Referências

1. Evers F e Mirlin AD. Anderson transitions. *Rev. Mod. Phys.* 2008 Oct; 80(4):1355–417. DOI: 10.1103/RevModPhys.80.1355
2. Abanin DA, Altman E, Bloch I e Serbyn M. Colloquium: Many-body localization, thermalization, and entanglement. *Rev. Mod. Phys.* 2019 May; 91(2):021001. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.021001
3. Winkler K, Thalhammer G, Lang F, Grimm R, Hecker Denschlag J, Daley AJ, Kantian A, Büchler HP e Zoller P. Repulsively bound atom pairs in an optical lattice. *Nature* 2006 Jun; 441:853–6. DOI: 10.1038/nature04918
4. Bromberg Y, Lahini Y, Morandotti R e Silberberg Y. Quantum and Classical Correlations in Waveguide Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2009 Jun; 102(25):253904. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.253904
5. Lahini Y, Bromberg Y, Christodoulides DN e Silberberg Y. Quantum Correlations in Two-Particle Anderson Localization. *Phys. Rev. Lett.* 2010 Oct; 105(16):163905. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.163905
6. Peruzzo A, Lobino M, Matthews JCF, Matsuda N, Politi A, Poulios K, Zhou XQ, Lahini Y, Ismail N, Wörhoff K, Bromberg Y, Silberberg Y, Thompson MG e OBrien JL. Quantum Walks of Correlated Photons. *Science* 2010; 329:1500–3. DOI: 10.1126/science.1193515
7. Krimer DO e Khomeriki R. Realization of discrete quantum billiards in a two-dimensional optical lattice. *Phys. Rev. A* 2011 Oct; 84(4):041807. DOI: 10.1103/PhysRevA.84.041807
8. Lahini Y, Verbin M, Huber SD, Bromberg Y, Pugatch R e Silberberg Y. Quantum walk of two interacting bosons. *Phys. Rev. A* 2012 Jul; 86(1):011603. DOI: 10.1103/PhysRevA.86.011603
9. Corrielli G, Crespi A, Della Valle G, Longhi S e Osellame R. Fractional Bloch oscillations in photonic lattices. *Nature Communications* 2013 Mar; 4:1555. DOI: 10.1038/ncomms2578
10. Dufour G e Orso G. Anderson Localization of Pairs in Bichromatic Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2012 Oct; 109(15):155306. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.155306
11. Lee C, Rai A, Noh C e Angelakis DG. Probing the effect of interaction in Anderson localization using linear photonic lattices. *Phys. Rev. A* 2014 Feb; 89(2):023823. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.023823
12. Shepelyansky DL. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. 1994; 73:2607–10
13. Imry Y. Coherent Propagation of Two Interacting Particles in a Random Potential. *Europhysics Letters* 1995 Jun; 30:405. DOI: 10.1209/0295-5075/30/7/005

14. Fyodorov YV e Mirlin AD. Statistical properties of random banded matrices with strongly fluctuating diagonal elements. *Phys. Rev. B* 1995 Oct; 52(16):R11580–R11583. DOI: 10.1103/PhysRevB.52.R11580
15. Oppen F von, Wettig T e Müller J. Interaction-Induced Delocalization of Two Particles in a Random Potential: Scaling Properties. *Phys. Rev. Lett.* 1996 Jan; 76(3):491–4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.76.491
16. Ponomarev IV e Silvestrov PG. Coherent propagation of interacting particles in a random potential: The mechanism of enhancement. *Phys. Rev. B* 1997 Aug; 56(7):3742–59. DOI: 10.1103/PhysRevB.56.3742
17. Römer RA e Schreiber M. No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential. *Physical Review Letters* 1997; 78:515–8
18. Flach S, Ivanchenko M e Khomeriki R. Correlated metallic two-particle bound states in quasiperiodic chains. *Europhysics Letters* 2012 Jun; 98:66002. DOI: 10.1209/0295-5075/98/66002
19. Dias W, Lyra M e de Moura F. The role of Hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons. *Physics Letters A* 2010; 374:4554–8. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2010.09.005>
20. Longhi S e Valle GD. Tunneling control of strongly correlated particles on a lattice: a photonic realization. *Opt. Lett.* 2011 Dec; 36:4743–5. DOI: 10.1364/OL.36.004743
21. Goodman JW. *Speckle Phenomena in Optics: Theory and Applications*. Englewood: Roberts e Co., 2007
22. Heeman W, Steenbergen W, Dam GM van e Boerma EC. Clinical applications of laser speckle contrast imaging: a review. *Journal of biomedical optics* 2019 Aug 5; 24:1–11. DOI: 10.1117/1.jbo.24.8.080901
23. Verwohlt J, Reiser M, Randolph L, Matic A, Medina LA, Madsen A, Sprung M, Zozulya A e Gutt C. Low Dose X-Ray Speckle Visibility Spectroscopy Reveals Nanoscale Dynamics in Radiation Sensitive Ionic Liquids. *Phys. Rev. Lett.* 2018 Apr; 120(16):168001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.168001
24. Zhang Q, Gamekkanda JC, Pandit A, Tang W, Papageorgiou C, Mitchell C, Yang Y, Schwaerzler M, Oyetunde T, Braatz RD, Myerson AS e Barbastathis G. Extracting particle size distribution from laser speckle with a physics-enhanced autocorrelation-based estimator (PEACE). *Nature Communications* 2023; 14:1159. DOI: 10.1038/s41467-023-36816-2. Available from: <https://doi.org/10.1038/s41467-023-36816-2>
25. Luo Q, Patel JA e Webb KJ. Super-resolution sensing with a randomly scattering analyzer. *Phys. Rev. Res.* 2021 Dec; 3(4):L042045. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.L042045
26. Jendrzejewski F, Bernard A, Müller K, Cheinet P, Josse V, Piraud M, Pezzé L, Sanchez-Palencia L, Aspect A e Bouyer P. Three-dimensional localization of ultracold atoms in an optical disordered potential. *Nature Physics* 2012 May; 8:398–403. DOI: 10.1038/nphys2256

27. Bender N, Haig H, Christodoulides DN e Wise FW. Spectral speckle customization. *Optica* 2023 Oct; 10:1260–8. DOI: 10.1364/OPTICA.499461
28. Han S, Bender N e Cao H. Tailoring 3D Speckle Statistics. *Phys. Rev. Lett.* 2023 Mar; 130(9):093802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.130.093802
29. Bromberg Y e Cao H. Generating Non-Rayleigh Speckles with Tailored Intensity Statistics. *Phys. Rev. Lett.* 2014 May; 112(21):213904. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.213904
30. Exner K. *Sitzungsber. Kaiserl. Akad. Wiss. (Wien)* 1877; 76:522
31. Exner K. *Wiedemanns. Ann. Physik. Wiedemanns. Ann. Physik* 1880; 9:239
32. Von Laue M. *Sitzungsber. Akad. Wiss. (Berlin)* 1914; 44:1144
33. Von Laue M. *Mitt. Physik. Ges. Ziirich* 1916; 18:90
34. Von Laue M. *Verhandl. Deutsch. Phys. Ges. Verhandl. Deutsch. Phys. Ges.* 1917; 19:19
35. Rigden JD e Gordon EI. The granularity of scattered optical maser light. *Proc. IRE* 1962; 50:2367–8
36. Oliver BM. Sparkling spots and random diffraction. *Proc. IEEE* 1963; 51:220–1
37. Dainty JC, ed. *Laser speckle and related phenomena*. Vol. 9. Springer science business Media, 2013
38. Osche GR. *Optical Detection Theory for Laser Applications*. New York: John Wiley Sons, Inc., 2002
39. Wagner RF, Smith S, Sandrik JM e Lopez H. Statistics of Speckle in Ultrasound B-Scans. *IEEE Transactions on Sonics and Ultrasonics* 1983; 30:156–63
40. Wang J e Genack AZ. Transport through modes in random media. *Nature* 2011; 471:345–8. DOI: 10.1038/nature09824
41. Lee JS. *Computer Graphics and Image Processing*. *Computer Graphics and Image Processing* 1981; 17:24
42. Sutton M, Mochrie SGJ, Greytak T, Nagler SE, Berman LE, Held GA e Stephenson GB. Observation of speckle by diffraction with coherent X-rays. *Nature* 1991; 352:608–10
43. Dall RG, Hodgman SS, Manning AG, Johnsson MT, Baldwin KGH e Truscott AG. Observation of atomic speckle and Hanbury Brown–Twiss correlations in guided matter waves. *Nature Communications* 2011; 2:1–5
44. Goodman JW. Some fundamental properties of speckle. *JOSA* 1976; 66:1145–50
45. Alves CR, Jesus-Silva AJ e Fonseca EJ. Self-reconfiguration of a speckle pattern. *Optics Letters* 2014; 39:6320–3
46. Dainty JC, ed. *Laser Speckle and Related Phenomena*. 1<sup>a</sup> ed. Topics in Applied Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Springer Berlin, Heidelberg, 2013 Dec 18:XIII, 288. DOI: 10.1007/978-3-662-43205-1
47. Wolf E. *Introduction to the Theory of Coherence and Polarization of Light*. Cambridge University Press, 2007

48. Saleh BE e Teich MC. *Fundamentals of Photonics*. John Wiley & Sons, 2019
49. Goodman JW. *Statistical Optics*. 2<sup>a</sup> ed. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 2015
50. Ashcroft NW e Mermin ND. *Solid State Physics*. 1st. New York: Holt, Rinehart e Winston, 1976
51. Bravais A. Mémoire sur les systèmes formés par les points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace. *J. Ecole Polytech* 1850; 19:1–128
52. Bravais A. *Etudes cristallographiques Mémoire sur les*. Gauthier-Villars, 1866
53. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik* 1929; 52:555–600
54. Lawson CL, Hanson RJ, Kincaid DR e Krogh FT. Basic Linear Algebra Subprograms for Fortran Usage. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 1979; 5:308–23
55. Anderson E, Bai Z, Bischof C, Blackford S, Demmel J, Dongarra J, Croz JD, Greenbaum A, Hammarling S, McKenney A e Sorensen D. *LAPACK Users' Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematic 1999
56. Wilson AH. The theory of electronic semi-conductors. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 1931; 133:458–91
57. Anderson PW. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Phys. Rev.* 1958 Mar; 109(5):1492–505. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1492
58. Kati Y, Yu X e Flach S. Density resolved wave packet spreading in disordered Gross-Pitaevskii lattices. *SciPost Phys. Core* 2020; 3:006. DOI: 10.21468/SciPostPhysCore.3.2.006
59. Abrahams E, Anderson P, Licciardello DC e Ramakrishnan TV. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Physical Review Letters* 1979; 42:673
60. Zallen R. *The physics of amorphous solids*. John Wiley & Sons, 2008
61. Lifshitz IM, Gredeskul SA e Pastur LA. *Introduction to the theory of disordered systems*. New York: Wiley, 1988
62. Kramer B e MacKinnon A. Localization: Theory and experiment. *Reports on Progress in Physics* 1993; 56:1469
63. Czycholl G e Kramer B. Numerical investigation of the conductivity and electron localization of a one-dimensional disordered system. *Zeitschrift für Physik B - Condensed Matter* 1980; 39:193–206
64. Lahini Y, Avidan A, Pozzi F, Sorel M, Morandotti R, Christodoulides DN e Silberberg Y. Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices. *Physical Review Letters* 2008; 100:013906(4)
65. Schwartz T, Bartal G, Fishman S e Segev M. Transport and Anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices. *Nature* 2007; 446:52–5

66. Skipetrov S e Maynard R. Instabilities of waves in nonlinear disordered media. *Physical Review Letters* 2000; 85:736–9
67. Anderson MH, Ensher JR, Matthews MR, Wieman CE e Cornell EA. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science* 1995; 269:198–201
68. Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii LP e Stringari S. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Reviews of Modern Physics* 1999; 71:463–512
69. Lye JE, Fallani L, Modugno M, Wiersma DS, Fort C e Inguscio M. Bose-Einstein condensate in a random potential. *Physical Review Letters* 2005; 95:070401(4)
70. Roati G, D’Errico C, Fallani L, Fattori M, Fort C, Zaccanti M, Modugno G, Modugno M e Inguscio M. Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate. *Nature* 2008; 453:895–9
71. Kramer B, Ono Y e Ohtsuki T. Inverse participation number and fractal dimensionality of electronic states in a two-dimensional system in strong perpendicular magnetic field. *Journal of the Physical Society of Japan* 1989; 58:1705–16
72. Edwards JT e Thouless DJ. Numerical studies of localization in disordered systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics* 1972; 5:807–20
73. Moura FABF de e Lyra ML. Delocalization in the 1D Anderson Model with Long-Range Correlated Disorder. *Phys. Rev. Lett.* 1998 Oct; 81(17):3735–8. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3735
74. Griniasty M e Fishman S. Localization by pseudorandom potentials in one dimension. *Phys. Rev. Lett.* 1988 Mar; 60(13):1334–7. DOI: 10.1103/PhysRevLett.60.1334
75. Wu HL e Phillips P. Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.* 1991 Mar; 66(10):1366–9. DOI: 10.1103/PhysRevLett.66.1366
76. Mott NF e Peierls R. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. *Proceedings of the Physical Society* 1937; 49:72–3
77. Mott NF. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A* 1949; 62:416–22
78. Dias WS. Propriedades de Transporte em Sistemas de Baixa Dimensionalidade na Presença de Interação. PhD thesis, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas 2011 :159
79. Gebhard F. *The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods*. Springer 1997; 48:1–48
80. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 1963; 276:238–57
81. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 1964; 281:401–19
82. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 1964; 277:237–59

83. Imada M, Fujimori A e Tokura Y. Metal-insulator transition. *Philosophical Magazine Letters* 1998; 70:1039–263
84. Jaksch D, Bruder C, Cirac JI, Gardiner CW e Zoller P. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Physical Review Letters* 1998; 81:3108–11
85. Lieb EH. Exact analysis of an interacting bose gas. II. the excitation spectrum. *Physical Review* 1963; 130:1616–24
86. Lieb EH e Liniger W. Exact analysis of an interacting bose gas. I. the general solution and the ground state. *Physical Review* 1963; 130:1605–16
87. Lieb EH e Wu FY. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Physical Review Letters* 1968; 20:1445–8
88. Yang CN. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. *Physical Review Letters* 1967; 19:1312–5
89. Lieb EH e Wu FY. The one-dimensional hubbard model: A reminiscence. *Physical Review A* 2003; 321:1–27
90. Abraham M e Berkovites R. Persistent currents in an interacting 1D disordered ring: Manifestations of the Mott-Hubbard transition. *Physical Review Letters* 1993; 70:1509–12
91. Bouzerar G, Poilblanc D e Montambaux G. Persistent currents in one-dimensional disordered rings of interacting electrons. *Physical Review B* 1994; 49:8258–62
92. Lévy LP, Dolan G, Dunsmuir J e Bouchiat H. Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents. *Physical Review Letters* 1990; 64:2074–7
93. Müller-Groeling A, Weidenmüller HA e Lewenkopf CH. INTERACTING ELECTRONS IN MESOSCOPIC RINGS. 1993; 24:1273–5
94. Frahm K, Müller-Groeling A e Pichard JL. Effective  $\{\sigma\}$  model formulation for two interacting electrons in a disordered metal. *Physical Review Letters* 1996; 76:1509–12
95. Weinmann D, Müller-Groeling A, Pichard JL e Frahm K.  $H/2e$  oscillations for correlated electron pairs in disordered mesoscopic rings. *Physical Review Letters* 1995; 75:1598–601
96. Römer RA e Schreiber M. No Enhancement of the Localization Length for Two Interacting Particles in a Random Potential. *Phys. Rev. Lett.* 1997 Jan; 78(3):515–8. DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.515
97. Claude Cohen-Tannoudji Bernard Diu FL. *Quantum Mechanics, Volume 2: Angular Momentum, Spin, and Approximation Methods*. 2<sup>a</sup> ed. Wiley-VCH, 2019
98. Sakurai JJ. *Modern quantum mechanics*. Rev. ed. Addison-Wesley Pub. Co, 1994
99. Brito PE de, Rodrigues ES e Nazareno HN. Dynamics of two interacting electrons in a one-dimensional crystal with impurities. *Physica B: Condensed Matter* 2007; 388:393–403

100. Coêlho MB e Dias WS. Two-particles bounded states as a mechanism to weaken the Anderson localization in systems with structural disorder. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* 2020; 124:114371
101. Dias WS, Nascimento EM, Lyra ML e Moura FABF de. Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field. *Phys. Rev. B* 2007 Oct; 76(15):155124. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.155124
102. Claro F, Weisz JF e Curilef S. Interaction-induced oscillations in correlated electron transport. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 2003; 67:1–4
103. Dias W e Lyra M. Non monotonic influence of Hubbard interaction on the Anderson localization of two-electron wavepackets. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 2014; 411:35–41. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2014.05.059>
104. Lee C, Rai A, Noh C e Angelakis DG. Probing the effect of interaction in Anderson localization using linear photonic lattices. *Phys. Rev. A* 2014 Feb; 89(2):023823. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.023823
105. Evangelou SN, Xiong SJ e Economou EN. Anderson localization for two interacting electrons in a disordered chain. *Phys. Rev. B* 1996 Sep; 54(12):8469–73. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.8469
106. Evangelou SN e Katsanos DE. Two interacting electrons in a quasiperiodic chain. *Phys. Rev. B* 1997 Nov; 56(20):12797–804. DOI: 10.1103/PhysRevB.56.12797
107. Oliveira MFV, Moura FABF de, Souza AMC, Lyra ML e Almeida GMA. Non-Rayleigh signal of interacting quantum particles. *Phys. Rev. A* 2023 Aug; 108(2):023520. DOI: 10.1103/PhysRevA.108.023520
108. Beenakker CWJ, Venderbos JWF e Exter MP van. Two-Photon Speckle as a Probe of Multi-Dimensional Entanglement. *Phys. Rev. Lett.* 2009 May; 102(19):193601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.193601
109. Buarque ARC, Dias WS, Moura FABF de, Lyra ML e Almeida GMA. Rogue waves in discrete-time quantum walks. *Phys. Rev. A* 2022 Jul; 106(1):012414. DOI: 10.1103/PhysRevA.106.012414
110. Buarque ARC, Dias WS, Almeida GMA, Lyra ML e Moura FABF de. Rogue waves in quantum lattices with correlated disorder. *Phys. Rev. A* 2023 Jan; 107(1):012425. DOI: 10.1103/PhysRevA.107.012425
111. Kirkby W, Yee Y, Shi K e O’Dell DHJ. Caustics in quantum many-body dynamics. *Phys. Rev. Res.* 2022 Feb; 4(1):013105. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.013105
112. Dudley JM, Genty G, Mussot A, Chabchoub A e Dias F. Rogue waves and analogies in optics and oceanography. *Nature Reviews Physics* 2019 Nov; 1:675–89. DOI: 10.1038/s42254-019-0100-0
113. Tan Y, Bai XD e Li T. Super rogue waves: Collision of rogue waves in Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. E* 2022 Jul; 106(1):014208. DOI: 10.1103/PhysRevE.106.014208

- 
114. Höhmann R, Kuhl U, Stöckmann HJ, Kaplan L e Heller EJ. Freak Waves in the Linear Regime: A Microwave Study. *Phys. Rev. Lett.* 2010 Mar; 104(9):093901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.093901
  115. Morris B, Yadin B, Fadel M, Zibold T, Treutlein P e Adesso G. Entanglement between Identical Particles Is a Useful and Consistent Resource. *Phys. Rev. X* 2020 Oct; 10(4):041012. DOI: 10.1103/PhysRevX.10.041012
  116. Di Lorenzo Pires H, Woudenberg J e Exter MP van. Statistical properties of two-photon speckles. *Phys. Rev. A* 2012 Mar; 85(3):033807. DOI: 10.1103/PhysRevA.85.033807. Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.85.033807>
  117. Cai X, Yang H, Shi HL, Lee C, Andrei N e Guan XW. Multiparticle Quantum Walks and Fisher Information in One-Dimensional Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2021 Sep; 127(10):100406. DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.100406
  118. Giri MK, Mondal S, Das BP e Mishra T. Signatures of Nontrivial Pairing in the Quantum Walk of Two-Component Bosons. *Phys. Rev. Lett.* 2022 Jul; 129(5):050601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.050601
  119. Kittel C. Introduction to solid state physics. 7th ed. Wiley, 1996. Available from: [libgen.li/file.php?md5=a5688f3a74be059b13e48a3fd71312b7](http://libgen.li/file.php?md5=a5688f3a74be059b13e48a3fd71312b7)

# Apêndice A

## Demonstração do Intervalo de Energia do Modelo de Bloch

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

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

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

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

assim, A.1 torna-se

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

Onde reescreveremos o hamiltoniano da equação 3.6, como:

$$H = \varepsilon \sum_n |n\rangle\langle n| - J \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|), \quad (\text{A.4})$$

substituindo A.4 em A.3, teremos:

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

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

$$\begin{aligned}
 \sum_{n,n'} [\varepsilon \psi_{n'} | n \rangle \delta_{n,n'} - J(\psi_{n'} | n \rangle \delta_{n+1,n'} + \psi_{n'} | n \rangle \delta_{n-1,n'})] &= E \sum_{n'} \psi_{n'}^* \psi_{n'} | n' \rangle. \\
 \sum_{n,n'} [\varepsilon \psi_n^* \psi_{n'} \langle n' | n \rangle - J \psi_n^* (\psi_{n+1} \langle n' | n \rangle + \psi_{n-1} \langle n' | n \rangle)] &= E \sum_{n'} \psi_n^* \psi_n \langle n' | n \rangle \\
 \varepsilon \sum_n \psi_n^* \psi_n - J \sum_n \psi_n^* (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) &= E \sum_n \psi_n^* \psi_n \\
 \varepsilon \psi_n - J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) &= E \psi_n. \tag{A.5}
 \end{aligned}$$

Sabendo que podemos escrever as funções de Bloch como um serie de Fourier, já que são periódicas na rede recíproca, iremos expressar as amplitudes como  $\psi_n = \psi_0 e^{ikna}$ ,

$$\begin{aligned}
 E \psi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} &= \varepsilon \psi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} - J \psi_0 (e^{i\vec{k}(n+1)\vec{a}} + \psi_0 e^{i\vec{k}(n-1)\vec{a}}), \\
 E \psi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} &= \varepsilon \psi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} - J \psi_0 e^{i\vec{k}n\vec{a}} (e^{i\vec{k}\vec{a}} + e^{-i\vec{k}\vec{a}}), \\
 E &= \varepsilon - 2J \cos(\vec{k}\vec{a}).
 \end{aligned}$$

Com isso, podemos observar que as energias permitidas estão dentro do intervalo  $\varepsilon - 2J \leq E \leq \varepsilon + 2J$ . Dessa forma, podemos ver que a banda de energia é deslocada por  $\varepsilon$ , e a largura de energia depende de  $4J$ . Levando em conta que consideramos interações entre orbitais de átomos vizinhos, os elétrons são fortemente influenciados pelos orbitais atômicos locais e movem-se entre os átomos. Quando lidamos com  $N$  átomos idênticos, cada um contribuindo com orbitais para a formação de bandas de energia, onde esses níveis atômicos são não degenerados, cada nível atômico não degenerado fornece um par de orbitais. Como há  $N$  átomos, o total de orbitais é  $2N$  [119].

Portanto, como existem  $2N$  orbitais, podemos reescrever a relação de dispersão como:

$$E(k) = -2J \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \tag{A.6}$$

Como  $K = \frac{2\pi n}{N+1}$ , podemos escrever as autoenergias em função dos sítios da rede como:

$$E_n = -2J \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right). \tag{A.7}$$

Agora para analisar os aspectos dinâmicos do sistema a função de onda que deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle, \quad (\text{A.8})$$

com isso obtemos:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\epsilon_n \psi_n - J(\psi_{n+1} \psi_{n-1}). \quad (\text{A.9})$$

## Apêndice B

### Demonstração da relação de recorrência para partículas distinguíveis para o caso estático

Inicialmente, resolveremos a equação de Schrödinger independente do tempo, i.e,

$$H|\psi(m, n)\rangle = E|\psi(m, n)\rangle, \quad (\text{B.1})$$

para o lado esquerdo da equação acima temos:

$$\begin{aligned} H|\psi(m, n)\rangle &= J \sum_{j=1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, n)\rangle \\ &+ \sum_{j=1}^N \varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) |\psi(m, n)\rangle \\ &+ \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j |\psi(m, n)\rangle \end{aligned}$$

onde, por simplicidade, podemos escrever a expressão anterior como:

$$H|\psi(m, n)\rangle = H_1|\psi(m, n)\rangle + H_2|\psi(m, n)\rangle + H_3|\psi(m, n)\rangle$$

sendo

$$\begin{aligned} H_1|\psi(m, n)\rangle &= J \sum_{j=1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, n)\rangle \\ H_2|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^N \varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) |\psi(m, n)\rangle \end{aligned}$$

$$H_3|\psi(m, n)\rangle = \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j |\psi(m, n)\rangle$$

Assim, para  $H_1$  temos:

$$\begin{aligned} H_1|\psi(m, n)\rangle &= J \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, n)\rangle, \\ &= J \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} |\psi(m, n)\rangle_D, \\ &= J \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} |m, n\rangle, \\ &= J \sum_{j=1}^N \sum_{m,n} f_{m,n} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |m, n\rangle, \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} (|m+1, n\rangle + |m, n+1\rangle + |m-1, n\rangle + |m, n-1\rangle), \end{aligned}$$

agora para  $H_2$ , temos:

$$\begin{aligned} H_2|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^N \varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) |\psi(m, n)\rangle, \\ &= \sum_{j=1}^N \varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \sum_{m,n} f_{m,n} |\psi(m, n)\rangle_D, \\ &= \sum_{j=1}^N \varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \sum_{m,n} f_{m,n} |m, n\rangle, \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) |m, n\rangle, \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m |m, n\rangle + \varepsilon_n |m, n\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) |m, n\rangle, \end{aligned}$$

por fim para  $H_3$ , temos:

$$\begin{aligned}
 H_3|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j |\psi(m, n)\rangle \\
 &= \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j \sum_{m,n} f_{m,n} |\psi(m, n)\rangle_D \\
 &= \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j \sum_{m,n} f_{m,n} |m, n\rangle \\
 &= \sum_{j=1}^N \sum_{m,n} f_{m,n} U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j |m, n\rangle \\
 &= \sum_{m,n} f_{m,n} U \delta_{m,n} |m, n\rangle
 \end{aligned}$$

dessa forma ficamos com,

$$\begin{aligned}
 H|\psi(m, n)\rangle &= J \sum_{m,n} f_{m,n} (|m+1, n\rangle + |m, n+1\rangle + |m-1, n\rangle + |m, n-1\rangle) + \\
 &\quad \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) |m, n\rangle + \sum_{m,n} f_{m,n} U \delta_{m,n} |m, n\rangle
 \end{aligned}$$

então o valor esperado sera :

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(m, n) | H | \psi(m, n) \rangle &= \sum_{m,n} \sum_{m',n'} f_{m,n} f_{m',n'}^* \langle m', n' | [J \sum_{m,n} f_{m,n} (|m+1, n\rangle + |m, n+1\rangle + \\
 &\quad |m-1, n\rangle + |m, n-1\rangle) + \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) |m, n\rangle + \sum_{m,n} f_{m,n} U \delta_{m,n} |m, n\rangle]
 \end{aligned}$$

dessa forma obtemos:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(m, n) | H | \psi(m, n) \rangle &= \sum_{m,n} f_{m,n}^* [J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) \\
 &\quad + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U \delta_{m,n}) f_{m,n}],
 \end{aligned}$$

agora o lado direito de B.1, temos:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(m, n) | E | \psi(m, n) \rangle &= E \sum_{m,n} \sum_{m',n'} f_{m,n} f_{m',n'}^* \langle m', n' | m, n \rangle \\
 &= E \sum_{m,n} f_{m,n} f_{m,n}^*.
 \end{aligned}$$

Com isso obtemos a seguinte relação de recorrência:

$$E f_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n + U\delta_{m,n})f_{m,n} \quad (\text{B.2})$$

# Apêndice C

## Demonstração da relação de recorrência para o caso simétrico e antisimétrico

Podemos encontrar a relação de recorrência para esse caso de maneira análoga feito no apêndice B, aplicando:

$$|\psi(m, n)\rangle = \sum_{m, n} f_{m, n} |\psi(m, n)\rangle_S, \quad (\text{C.1})$$

no hamiltoniano.

Dividindo o hamiltoniana em 3 partes, temos:

$$\begin{aligned} H_1 |\psi(m, n)\rangle &= J \sum_{j=1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, n)\rangle \\ H_2 |\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^N \varepsilon_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) |\psi(m, n)\rangle \\ H_3 |\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j |\psi(m, n)\rangle \end{aligned}$$

Assim para  $H_1$ , com  $m = n$ , temos:

$$\begin{aligned}
 H_1|\psi(m, m)\rangle &= J \sum_{j=1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, m)\rangle, \\
 &= J \sum_{j=1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} |\psi(m, m)\rangle_S, \\
 &= J \sum_{j=1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} |m, m\rangle, \\
 &= J \sum_{j=1} \sum_{m,n} f_{m,n} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |m, m\rangle, \\
 &= J \sum_{m,n} f_{m,n} (\underline{|m+1, m\rangle} + \overline{|m, m+1\rangle} + |m-1, m\rangle + \overline{|m, m-1\rangle}),
 \end{aligned}$$

note que tanto o termo sublinhado quanto o termo sobrelinhado podem ser escrito como uma combinação simétrica para cada um dos estados, então:

$$H_1|\psi(m, m)\rangle = J \sum_m f_{m,m} (\sqrt{2}|\psi(m+1, m)\rangle_S + \sqrt{2}|\psi(m-1, m)\rangle_S), \quad (\text{C.2})$$

para  $H_2$  e  $m = n$ , temos:

$$\begin{aligned}
 H_2|\psi(m, m)\rangle &= \sum_{j=1}^N (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) \sum_m f_{m,m} |m, m\rangle, \\
 &= \sum_m f_{m,m} \sum_{j=1}^N (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) |m, m\rangle, \\
 &= \sum_m f_{m,m} (\varepsilon_m + \varepsilon_m) |m, m\rangle,
 \end{aligned}$$

para  $H_3$  e  $m = n$ , temos:

$$\begin{aligned}
 H_3|\psi(m, m)\rangle &= \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j \sum_m f_{m,m} |m, m\rangle, \\
 &= \sum_m f_{m,m} \sum_{j=1}^N U a_j^\dagger a_j b_j^\dagger b_j |m, m\rangle, \\
 &= \sum_m f_{m,m} U \delta_{m,m} |m, m\rangle,
 \end{aligned}$$

então a eq. de Schödinger para  $m = n$  é:

$$H|\psi(m, m)\rangle = J \sum_m f_{m,m}(\sqrt{2}|\psi(m+1, m)\rangle_S + \sqrt{2}|\psi(m-1, m)\rangle_S) + \sum_m f_{m,m}(2\varepsilon_m + U\delta_{m,m})|\psi(m, m)\rangle$$

fazendo  $\langle\psi(m, m)|H|\psi(m, m)\rangle$ , temos:

$$E f_{m,m} = J\sqrt{2}(f_{m,m+1} + f_{m,m-1}) + (2\varepsilon_m + U\delta_{m,m})f_{m,m}.$$

Fazendo agora  $n = m + 1$ , temos:

$$\begin{aligned} H_1|\psi(m, m+1)\rangle &= J \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, m+1)\rangle, \\ &= J \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m, m+1\rangle + |m+1, m\rangle), \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) (|m, m+1\rangle + |m+1, m\rangle), \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m+1, m+1\rangle + |m, m+2\rangle + \overline{|m-1, m+1\rangle} \\ &+ \overline{|m, m\rangle} + |m+2, m\rangle + |m+1, m+1\rangle + \overline{|m, m\rangle} + \overline{|m+1, m-1\rangle}) \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} (\sqrt{2}|\psi(m+1, m+1)\rangle_S + |\psi(m, m+2)\rangle_S + |\psi(m-1, m+1)\rangle_S + \sqrt{2}|\psi(m, m)\rangle_S), \end{aligned}$$

para  $H_2$ , temos:

$$\begin{aligned} H_2|\psi(m, m+1)\rangle &= \sum_{m,m} f_{m,m} \sum_{j=1}^N (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m, m+1\rangle + |m+1, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m + \varepsilon_{m+1}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|m, m+1\rangle + |m+1, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m + \varepsilon_{m+1}) |\psi(m, m+1)\rangle_S, \end{aligned}$$

note que  $H_3$  é zero uma vez que  $m \neq n$ , então para  $m \neq n$  e  $n = m + 1$ , temos:

$$\begin{aligned} H|\psi(m, m+1)\rangle &= J \sum_{m,n} f_{m,n} (\sqrt{2}|\psi(m+1, m+1)\rangle_S + |\psi(m, m+2)\rangle_S \\ &+ |\psi(m-1, m+1)\rangle_S + \sqrt{2}|\psi(m, m)\rangle_S) + \sum_{m,n} f_{m,n} (\varepsilon_m + \varepsilon_{m+1}) |\psi(m, m+1)\rangle_S, \end{aligned}$$

dessa forma:

$$Ef_{m,m+1} = J(\sqrt{2}f_{m+1,m+1} + f_{m,m+2} + f_{m-1,m+1} + \sqrt{2}f_{m,m}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_{m+1})f_{m,m+1}.$$

Por fim, para  $m \neq n$  e  $n > m + 1$ , teremos:

$$\begin{aligned} H_1|\psi(m, n)\rangle &= J \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_{j+1}^\dagger + b_{j+1} b_{j+1}^\dagger) |\psi(m, m+1)\rangle_S, \\ &= J \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_{j+1}^\dagger + b_{j+1} b_{j+1}^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m, n\rangle + |n, m\rangle), \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_{j+1}^\dagger + b_{j+1} b_{j+1}^\dagger) (|m, n\rangle + |n, m\rangle) \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m+1, n\rangle + \overline{|m, n+1\rangle} + \underline{|m-1, n\rangle} + \overline{\overline{|m, n-1\rangle}} \\ &\quad + \underline{|n, m+1\rangle} + \overline{|n+1, m\rangle} + \underline{\underline{|n, m-1\rangle}} + \overline{\overline{|n-1, m\rangle}}) \end{aligned}$$

$$H_1|\psi(m, m+1)\rangle = J \sum_{m,n} f_{m,n} (|\psi(m+1, n)\rangle_S + |\psi(m, n+1)\rangle_S + |\psi(m-1, n)\rangle_S + |\psi(m, n-1)\rangle_S)$$

para  $H_2$ , temos:

$$\begin{aligned} H_2|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^{N-1} (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) |\psi(m, n)\rangle_S, \\ &= \sum_{j=1}^{N-1} (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} f_{m,n} (|m, n\rangle + |n, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) (|m, n\rangle + |n, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) (|m, n\rangle + |n, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) |\psi(m, n)\rangle_S, \end{aligned}$$

assim obtemos,

$$Ef_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n)f_{m,n}.$$

Então para o caso simétrico temos as seguintes relações de recorrência:

$$\begin{cases} Ef_{m,m} = J\sqrt{2}(f_{m,m+1} + f_{m,m+1}) + (2\varepsilon_m + U\delta_{m,m})f_{m,m}. \\ Ef_{m,m+1} = J(\sqrt{2}f_{m+1,m+1} + f_{m,m+2} + f_{m-1,m+1} + \sqrt{2}f_{m,m}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_{m+1})f_{m,m+1}. \\ Ef_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n)f_{m,n}. \end{cases}$$

Agora para a parte antissimétrica  $|\psi(m, n)\rangle$ , teremos para  $H_1$ :

$$\begin{aligned} H_1|\psi(m, N)\rangle &= J \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) |\psi(m, m+1)\rangle_A, \\ &= J \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger b_j + a_{j+1} a_j^\dagger + b_{j+1} b_j^\dagger) \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m, n\rangle - |n, m\rangle), \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (|m+1, n\rangle + \overline{|m, n+1\rangle} + \underline{|m-1, n\rangle} - \overline{\overline{|m, n-1\rangle}} \\ &\quad - \underline{|n, m+1\rangle} - \overline{|n+1, m\rangle} - \underline{\underline{|n, m-1\rangle}} + \overline{\overline{|n-1, m\rangle}}) \\ &= J \sum_{m,n} f_{m,n} (|\psi(m+1, n)\rangle_A + |\psi(m, n+1)\rangle_A + |\psi(m-1, n)\rangle_A + |\psi(m, n-1)\rangle_A), \end{aligned}$$

e para  $H_2$ , teremos,

$$\begin{aligned} H_2|\psi(m, n)\rangle &= \sum_{j=1}^{N-1} (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) |\psi(m, n)\rangle_A, \\ &= \sum_{j=1}^{N-1} (\varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \varepsilon_j b_j^\dagger b_j) \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} f_{m,n} (|m, n\rangle - |n, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) (|m, n\rangle - |n, m\rangle), \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon_m + \varepsilon_n) |\psi(m, n)\rangle_A, \end{aligned}$$

note que para esse caso  $H_3$  não contribui, uma vez que não temos estados de culpa ocupação nesse subespaço. Assim obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$Ef_{m,n} = J(f_{m+1,n} + f_{m,n+1} + f_{m-1,n} + f_{m,n-1}) + (\varepsilon_m + \varepsilon_n)f_{m,n}.$$