

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

**ADHEMAR RANCIARO NETO**

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS DE BAIXA  
DIMENSIONALIDADE COM INTERAÇÃO  
ELÉTRON-FÔNON E CAMPOS ELÉTRICOS.**

Maceió  
2016

**ADHEMAR RANCIARO NETO**

**Transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade  
com interação elétron-fônon e campos elétricos.**

*Tese apresentada ao programa de pós-graduação  
do Instituto de Física da Universidade Federal  
de Alagoas, como requisito parcial para a obten-  
ção do título de Doutor em Física.*

*Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Bar-  
ros Fidelis de Moura*

**Maceió  
2016**

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

**Bibliotecário Responsável: Valter dos Santos Andrade**

R185t Ranciaro Neto, Adhemar.

Transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade com interação elétron-fônon e campos elétricos / Adhemar Ranciaro Neto - 2016.

63 f. : il., graf.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Tese (doutorado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2016.

Bibliografia: f. [42]-46.

Anexos: f. [47]-63.

1. Processos de transporte eletrônico. 2. Desordem não correlacionada. 3. Campo elétrico. 4. Ondas acústicas. 5. Elétron-fônon. 6. Rede de Morse. I. Título.

CDU: 538.935



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

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

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE**  
**TESE DE DOUTORADO**

*“Transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade  
com interação elétron-fonon e campos elétricos”*

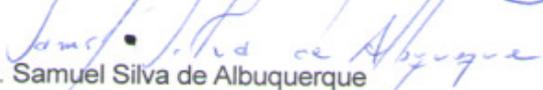
por

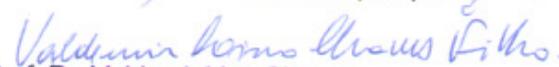
Adhemar Ranciaro Neto

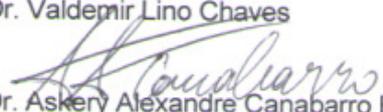
A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Samuel Silva de Albuquerque, da Universidade Federal de Alagoas no Campus Arapiraca, Valdemir Lino Chaves, do Instituto Federal de Alagoas, Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva, da Universidade Federal de Alagoas, Campus Arapiraca, Alexandre Manoel de Moraes Carvalho, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Iram Marcelo Gléria, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato aprovado com grau “A”.

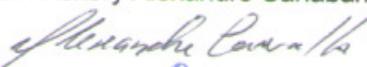
Maceió, 30 de junho de 2016

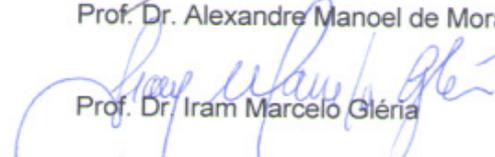
  
Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

  
Prof. Dr. Samuel Silva de Albuquerque

  
Prof. Dr. Valdemir Lino Chaves

  
Prof. Dr. Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva

  
Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes Carvalho

  
Prof. Dr. Iram Marcelo Gléria

A minha esposa, Carmen.

## AGRADECIMENTOS

- Agradeço a Deus, por nos prover a realidade maravilhosa e intrigante e, ao mesmo tempo, por dotar-nos de amor pelo conhecimento, o que acaba por tornar a experiência educacional um processo fascinante;
- Aos meus pais, pela possibilidade de me fornecerem uma boa instrução e de transmitirem a mim alguns valores caros à vida social;
- A minha esposa, Carmen e à sua família (Carlos, Lucia e Heloisa) por momentos de alegria e de reflexão;
- Ao professor Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, por ser um verdadeiro mestre escola, guiando-me pelos caminhos tortuosos da ascensão intelectual;
- Aos discentes da pós graduação do IF pelo companheirismo;
- Aos demais membros não discentes do IF pelo apoio em questões acadêmicas e administrativas;

*"We do not know a truth without knowing its cause."*

— ARISTÓTELES

# Resumo

Neste trabalho foi estudado o problema dinâmico de um elétron em dois sistemas unidimensionais distintos: (1) rede não harmônica com interação elétron-fônon e sob a ação de um campo elétrico estático aplicado paralelamente a ela e (2) rede harmônica com desordem diagonal não correlacionada, com interação elétron-fônon e sob a influência de ondas acústicas de superfície (SAW). Nos dois casos, foram utilizados formalismo quântico para o estudo do elétron e uma Hamiltoniana clássica para as vibrações da cadeia. Além disso, o acoplamento do ente quântico com a rede foi descrito a partir da energia de transferência entre íons vizinhos, com aquela sendo dependente da distância efetiva destes. Foi aplicado o método numérico de expansão truncada de Taylor para a evolução temporal da equação de Schrödinger dependente do tempo em ambos os casos, enquanto para a dinâmica das deformações foram empregados métodos distintos (Euler e diferenças finitas). Os resultados de (1) apontaram para a ocorrência de uma competição entre o acoplamento elétron-fônon e o campo elétrico. O primeiro promove um par elétron-soliton que se move ao longo da cadeia e o segundo aprisiona o elétron em torno de sua posição inicial criando oscilações semelhantes às de Bloch. No sistema (2), a associação entre SAW e a interação elétron-rede destroem o fenômeno da localização de Anderson permitindo o transporte de carga, mesmo em níveis altos de desordem. Os níveis de precisão numérica são aceitáveis e os cálculos estão em consonância com os preceitos teóricos.

**Palavras-chave:** Transporte Eletrônico. Desordem não correlacionada. Campo Elétrico. Ondas acústicas. Elétron-fônon. Rede de Morse.

# Abstract

In this work we studied electron dynamics in two 1-D distinct systems: (1) anharmonic lattice with electron-phonon interaction under the effect of a static parallel electric field and (2) harmonic alloy with uncorrelated diagonal disorder, electron-phonon interaction and under the effect of surface acoustic wave (SAW). In both cases we used quantum mechanics formalism for the electron and a classical Hamiltonian for chain vibrations. Moreover, electron-phonon coupling was described by a transfer energy function which depends on relative distance of nearest neighbor ions. We developed numerical calculation employing Taylor truncated expansion method for Schrödinger's equation time evolution operator and other two for lattice deformation (Euler and finite difference). Results (1) point out to the existence of a competition among electron-lattice coupling and electric field. The former promotes a electron-soliton pair formation, which moves along the chain and the latter traps electron around initial position generating Bloch-like oscillations. On system (2), association between SAW and electron-phonon interaction promotes the breakdown of Anderson localization and charge transport even in a high disorder level. We had acceptable numerical tolerance and our calculations are in agreement to the theory.

**Keywords:** Electronic transport. Uncorrelated disorder. Electric field. Acoustic wave. Electron-phonon. Morse lattice.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>1.1</b>	<b>Transporte de carga antes do advento da Mecânica Quântica</b>	<b>2</b>
1.1.1	Modelo de Drude	2
<b>1.2</b>	<b>Teoria quântica e transporte eletrônico</b>	<b>4</b>
1.2.1	Modelo de Sommerfeld	4
1.2.2	Modelo de Bloch	7
1.2.3	Modelo de Anderson	8
<b>1.3</b>	<b>Efeitos de interação</b>	<b>13</b>
1.3.1	Campo elétrico	13
1.3.2	Interação elétron-fônon e ondas acústicas de superfície	15
<b>2</b>	<b>REDE DE MORSE COM CAMPO ELÉTRICO</b>	<b>19</b>
<b>2.1</b>	<b>Introdução</b>	<b>19</b>
<b>2.2</b>	<b>O Modelo</b>	<b>19</b>
<b>2.3</b>	<b>Resultados e Discussão</b>	<b>23</b>
<b>3</b>	<b>REDE UNIDIMENSIONAL NA PRESENÇA DE DESORDEM E DE ONDAS ACÚSTICAS</b>	<b>32</b>
<b>3.1</b>	<b>Introdução</b>	<b>32</b>
<b>3.2</b>	<b>O Modelo</b>	<b>32</b>

SUMÁRIO	10
<b>3.3 Resultados e Discussão</b> . . . . .	35
<b>4 CONCLUSÃO</b> . . . . .	40
<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	42
<b>ANEXO A – ARTIGO 1: ELECTRONIC DYNAMICS UNDER EFFECT OF A NONLINEAR MORSE INTERACTION AND A STATIC ELECTRIC FIELD</b> . . . . .	47
<b>ANEXO B – ARTIGO 2: ELECTRONIC TRANSPORT IN DISORDERED CHAINS MEDIATED BY INTERACTIONS WITH ACOUSTIC WAVES</b> . . . . .	57

# 1 INTRODUÇÃO

O objetivo proposto neste volume foi o de investigar propriedades de transporte em baixa dimensionalidade na presença de desordem estrutural, em conjunto com termos de interação.

Dentro deste ambiente, foram desenvolvidos alguns ensaios numéricos descrevendo, em detalhes, o transporte de carga e suas especificidades.

Os sistemas estudados foram de dois tipos. Em ambos, teve-se por finalidade compreender a evolução temporal de um pacote eletrônico inicialmente localizado em torno do centro do material, este representado nas simulações numéricas por uma cadeia unidimensional de  $N$  átomos.

A primeira investigação consistiu em uma cadeia não harmônica sob atuação conjunta de um campo elétrico estático e do acoplamento elétron-rede; neste tipo sistema não linear, a presença de soliton na rede suscita uma dinâmica eletrônica característica, com um considerável espectro de novos fenômenos.

O outro estudo estribou-se em uma cadeia harmônica com desordem local não correlacionada na distribuição atômica, além da presença de interação elétron-fônon e da incidência de ondas harmônicas de deformações da rede.

Visando a estabelecer uma ordem para a compreensão dos elementos apresentados, a sequência de tópicos adotada neste trabalho segue, abaixo, exposta.

No restante do capítulo 1, foram apresentados os principais modelos de condução de carga em sólidos, além um resumo dos efeitos de interação estudados nos capítulos posteriores.

Os capítulos 2 e 3 contêm os estudos elencados no objetivo do trabalho.

A conclusão desta obra foi desenvolvida no capítulo 4 e, na sequência, foram inseridos dois anexos contendo, cada um, artigos publicados em periódicos especializadas com sistema de *peer review* referentes aos problemas aqui expostos.

## 1.1 Transporte de carga antes do advento da Mecânica Quântica

### 1.1.1 Modelo de Drude

Logo após a descoberta do elétron por J. J. Thomson em 1897, no ano de 1900, o físico P. Drude, elaborou um modelo, baseado na teoria clássica, para descrever a condução elétrica em metais (DRUDE, 1900; ASHCROFT; MERMIN, 2011). Sua ideia era descrever um gás de elétrons livres (não interagentes) em conjunto com partículas de carga oposta (neutralidade elétrica do metal) e muito mais pesadas que aquelas, consideradas imóveis. Isto bastava para tal representação, visto que, o estudioso considerou um metal como uma união de elementos em que, somente aos elétrons de valência era permitido o movimento no arranjo.

De modo semelhante ao gás ideal, a distribuição estatística das velocidades das partículas é a de Maxwell-Boltzmann. Logo, a energia de translação do sistema corresponde a  $\frac{3}{2}k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura absoluta.

Em síntese, as suposições da teoria são as seguintes:

- a) As colisões entre elétrons e íons são instantâneas e não correlacionadas. O espalhamento entre elétrons não é levado em consideração;
- b) As interações entre partículas devido a potenciais são desprezadas. Somente as interações relacionadas a campos externos aplicados ao sistema são consideradas;
- c) A probabilidade de um elétron colidir em um tempo  $dt$  é  $\frac{dt}{\tau}$ , onde  $\tau$  é o tempo livre médio entre colisões e independe da posição e da velocidade da partícula; e
- d) Os elétrons atingem o equilíbrio térmico com sua vizinhança apenas por meio de colisões. A velocidade de saída do ente é compatível com a temperatura da região em que ocorreu o abalroamento.

Neste modelo, a corrente elétrica é caracterizada pelo movimento ordenado dos elétrons de condução (partículas livres). A resistência elétrica é associada às colisões entre elétrons e íons. Este julgamento não mais prospera devido à evolução dos trabalhos envolvendo transporte de carga: a resistência elétrica é explicada pelo espalhamento do elétron em modos de vibração da rede ou em defeitos desta.

Há restrições à aplicação indiscriminada do gás de elétrons livres nos metais. Tal conjunto de hipóteses possui eficácia aproximada no estudo de elétrons de condução, não podendo ser empregado em outros elétrons de valência de um metal, tampouco em elétrons de valência de um isolante, pois não contribuem para a condutividade elétrica do sistema.

### 1.1.1.1 Condutividade elétrica DC de um metal

A lei de Ohm expressa a relação entre a densidade de corrente  $\mathbf{j}$  e o campo elétrico  $\mathbf{E}$  atuando sobre o material:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.1)$$

onde  $\sigma$  é a condutividade. Ao longo do texto, as variáveis em negrito representam grandezas vetoriais. É possível, por meio do modelo de Drude, deduzir (1.1).

Considerando  $n$  elétrons de condução por unidade de volume do sistema  $V$  e a carga elementar  $-e$ , a densidade de corrente  $\mathbf{j}$  torna-se:

$$\mathbf{j} = \frac{I}{A} \mathbf{a} = \frac{\Delta Q}{\Delta t A} \mathbf{a} = \frac{-neV}{\Delta t A} \mathbf{a} = -nev \quad (1.2)$$

onde  $I$  é a corrente elétrica,  $A$  é a seção transversal sobre a qual os portadores de carga incidem,  $\mathbf{a}$  é o vetor normal a esta,  $\Delta Q = -neV$  é o número de elétrons que passa por  $A$ , e  $\mathbf{v}$  é o vetor velocidade média destes.

Para um elétron de massa  $m$ , que tenha acabado de sofrer uma colisão, com velocidade de saída  $\mathbf{v}_s$ , e que esteja sob a influência de um campo elétrico  $\mathbf{E}$ , tem sua velocidade final, em um tempo  $t$  antes da colisão seguinte, igual a

$$\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_s - \frac{e\mathbf{E}t}{m} \quad (1.3)$$

Por se tratar de um gás de elétrons, a direção da velocidade de saída é aleatória, portanto, sua média é zero. Como o tempo médio entre colisões é  $\tau$ , a velocidade média do conjunto de portadores de carga é:

$$\mathbf{v} = \langle \mathbf{v}_f \rangle = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m} \quad (1.4)$$

Substituindo (1.4) em (1.2), obtém-se:

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} \quad (1.5)$$

Deste modo, ficou demonstrada a lei de Ohm a partir do modelo de Drude, com  $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ . O tempo de relaxação pode, agora, ser calculado a partir da expressão  $\tau = \frac{m\sigma}{ne^2}$ .

Como a contribuição dada pelo campo elétrico é pequena em relação à velocidade de cada elétron, então, na média, os elétrons movem-se na velocidade térmica  $\mathbf{v}_{th}$ , obtida, portanto, a partir da equipartição clássica de energia  $\frac{1}{2}mv_{th}^2 = \frac{3}{2}k_B T$ .

A distância média que os elétrons viajam entre duas colisões é chamada de caminho livre médio, sendo este dado por  $\ell = v_{th}\tau$ .

## 1.2 Teoria quântica e transporte eletrônico

### 1.2.1 Modelo de Sommerfeld

Em 1928, o físico A. Sommerfeld desenvolveu sua teoria de gás de elétrons livres para simular a condução de eletricidade em um metal aplicando o formalismo, ainda incipiente, da Mecânica quântica (SOMMERFELD, 1928; ASHCROFT; MERMIN, 2011). Em linhas gerais, o cientista utilizou a equação de Schrödinger em conjunto com o princípio de exclusão de Pauli (dois ou mais elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico) para estudar o transporte de carga e outras propriedades.

Seja  $N$  elétrons confinados em uma caixa cúbica de lado  $L$  e volume  $V$ . O número de elétrons por unidade de volume é, portanto,  $n = \frac{N}{V}$ . Os entes livres movem-se sob potencial constante  $U$  que, por simplicidade, foi igualado a zero. Além disso, estes não interagem entre si, e nem com os íons e sofrem espalhamento em direções aleatórias.

A partir das considerações dadas, a dinâmica eletrônica é descrita pela equação de Schrödinger independente do tempo para um elétron livre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

Uma solução para a eq. (1.6) é a onda plana (1.7), que representa a partícula livre com momento  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ , onde  $\mathbf{k} = k_x\vec{x} + k_y\vec{y} + k_z\vec{z}$  é o vetor de onda e  $k = |\mathbf{k}|$ .

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \end{aligned} \quad (1.7)$$

Apesar de tal resultado não ser adequado para descrever o estado do fermion, pois sua posição torna-se indefinida e isto acarreta levar em consideração as influências das extremidades da caixa, faz-se necessário utilizá-lo no sentido de apresentar um entendimento qualitativo do transporte de carga. Assim, (1.7) deve satisfazer as condições de contorno

nas superfícies da caixa, dadas por

$$\begin{aligned} k_x &= n_x \frac{2\pi}{L} \\ k_y &= n_y \frac{2\pi}{L} \\ k_z &= n_z \frac{2\pi}{L} \end{aligned} \quad (1.8)$$

onde  $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Tais condições (1.8) são periódicas no sentido de que (1.7) possui, por exemplo, o mesmo valor em  $x$  e em  $L + x$ , ou seja,  $e^{ik_x x} = e^{ik_x(x+L)}$ .

### 1.2.1.1 O estado fundamental do gás de elétrons livres

De acordo com as condições de contorno periódicas, é possível representar o sistema por meio de uma rede de pontos no espaço de vetores de onda (espaço  $k$ ). Cada ponto representa dois elétrons de *spins* opostos ( $\pm \frac{\hbar}{2}$ ). O volume que envolve cada ponto no diagrama é  $(\frac{2\pi}{L})^3$ . Logo, o número de pontos por unidade de volume é igual a  $(\frac{L}{2\pi})^3$ .

No estado fundamental, todos os  $N$  elétrons se arranjam para ocupar os estados de menor energia possível. Se  $N \gg 1$ , os estados preenchidos formam uma esfera no espaço  $k$ , centrada em  $k = 0$ , chamada de esfera de Fermi. O raio desta ( $k_F$ ) é o vetor de onda de Fermi e está associado ao estado em que o elétron está alocado na superfície da esfera. A energia correspondente (energia de Fermi -  $E_F$ ) é dada por

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (1.9)$$

O número de elétrons dentro da esfera de Fermi é dado pelo volume da esfera multiplicado pelo número de partículas por unidade de volume da rede, ou seja, pela densidade de elétrons no espaço  $k$ :

$$N = \left[ \frac{4}{3} \pi k_F^3 \right] \left[ 2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \right] \quad (1.10)$$

Rearranjando a equação (1.10), é possível encontrar o raio e a energia de Fermi.

$$\begin{aligned} k_F &= (3n\pi)^{\frac{1}{2}} \\ E_F &= \frac{\hbar^2}{2m} (3n\pi)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (1.11)$$

onde  $n = \frac{N}{V} = \frac{N}{L^3}$  é o número de elétrons por unidade de volume no espaço métrico.

A temperatura de Fermi é dada por  $T_F = \frac{E_F}{k_B}$ . A velocidade de Fermi de um elétron

pode ser obtida do seguinte modo:  $mv_F = \hbar k_F$ .

Nos metais, a energia de Fermi é da ordem de 1-10 eV. Tal fato evidencia que a energia cinética de um elétron de condução neste modelo é maior do que a determinada pelo modelo de Drude.

### 1.2.1.2 Conditividade Elétrica

Ao se aplicar o campo elétrico de magnitude  $E$  ao sistema, o elétron livre, que satisfaz (1.7) e (1.8), possui momento de intensidade igual a  $p = \hbar k$ . Considerando a segunda lei de Newton,  $\frac{dp}{dt} = -eE$ , então, após um tempo  $dt$ , o vetor de onda, originalmente  $k$ , transforma-se em  $k' = k + dk = k - \left(\frac{eE}{\hbar} dt\right)$ . Assim, o campo elétrico faz com que todos os elétrons mudem de estado ao mesmo tempo, mantendo a configuração, no espaço  $k$ , na forma da esfera de Fermi com o centro deslocado para o novo valor médio de vetores de onda  $k_m$ . Logo, a equação da dinâmica dos entes quânticos é dada por

$$k_m = \frac{-eE}{\hbar} t \quad (1.12)$$

A resistência elétrica depende do espalhamento dos elétrons sobre as vibrações e sobre os defeitos do metal. Como a variação da energia eletrônica é muito menor que a energia de Fermi, somente aqueles que ocupam estados em torno da superfície da esfera de Fermi contribuem para tal fenômeno. Os elétrons mais internos, para atingirem os estados de partícula livre, devem absorver uma quantidade muito grande de energia. Portanto, estes não participam das mudanças de energia associadas à resistência elétrica do material.

O tempo médio de espalhamento é  $\tau$ , análogo ao tempo de relaxação de Drude. Assim, a velocidade de grupo dos elétrons é  $v_m = \frac{\hbar k_m}{m}$ . Sob efeito do campo elétrico, entre colisões, torna-se:

$$v_m = \frac{-eE\tau}{m} \quad (1.13)$$

A densidade de corrente é obtida utilizando o resultado da eq. (1.13) resultando a expressão abaixo

$$j = -nev_m = -\frac{ne^2 E \tau}{m} = \sigma E \quad (1.14)$$

Assim, obtem-se a expressão para a condutividade  $\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m}$ , semelhante ao encontrado por Drude.

### 1.2.2 Modelo de Bloch

Na primeira metade do século XX, a descoberta dos raios X propiciou avanços no estudo dos cristais no sentido de se confirmarem suas propriedades geométricas, como por exemplo, a periodicidade da estrutura cristalina. Surgiu, então a necessidade de uma nova descrição da dinâmica eletrônica, que inicialmente fora abrandada pelo físico F. Bloch. Em seu modelo, Bloch (1929) incorporou o fato de que a periodicidade da rede possui tamanho de mesma ordem do comprimento de onda de de Broglie do elétron de Sommerfeld, a mecânica quântica e a interação elétron-íon. Todavia, tais avanços concorreram com a hipótese restritiva de que interações entre elétrons seriam desprezadas (aproximação de elétrons independentes). Desta forma, o ente quântico percebe um potencial efetivo  $U(\mathbf{r})$  e seus estados devem satisfazer à equação monoelétrica de Schrödinger independente do tempo.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi = E\psi \quad (1.15)$$

O período do potencial  $U(\mathbf{r})$  é dado pelo vetor da rede de Bravais  $\mathbf{R}$ . Assim, as soluções para a eq. (1.15) podem ter a forma de uma onda plana multiplicada por uma função com a periodicidade da rede

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.16)$$

onde  $u_{nk}(\mathbf{r}) = u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  para todo  $\mathbf{R}$  na rede de Bravais e  $n$  é o índice de bandas, configurando a existência de muitos autoestados independentes para cada vetor de onda  $k$ . Em vista disso, o resultado em (1.16) pode ser reformulado para a igualdade

$$\psi_{nk}(\mathbf{R} + \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.17)$$

que consiste no Teorema de Bloch. Este resultado é a descrição da dinâmica do elétron em uma rede cristalina ordenada, homogênea e com interação somente entre elétron e íon.

Em um sistema macroscópico, os espaços entre os níveis de energia podem ter aproximação infinitesimal, de modo que o espectro de autoenergias ( $E_n(\mathbf{k})$ ) torna-se contínuo formando as bandas energéticas.

O modelo em tela trouxe implicações no estudo da condução dos elétrons. Ressalta-se, dentre elas, que o ente se estende por todo o sistema e que tornou-se possível explicar traços distintivos entre condutores, semicondutores e isolantes. A. H. Wilson (WILSON, 1931a; WILSON, 1931b) delinea tais categorias com base na aplicação da estatística de Fermi-Dirac e do princípio da exclusão de Pauli aos estados de Bloch no cristal. P. M. Morse e R. Peierls (MORSE, 1930; PEIERLS, 1930) apontam para o fato de que quando muitos átomos

estão próximos, seus níveis de energia formam regiões contínuas denominadas bandas energéticas e que existem entre elas espaços em que não existem orbitais eletrônicos (*gap* de energia).

Assim, um cristal comporta-se como um isolante quando tem suas bandas de energia totalmente preenchidas de elétrons ou vazias. A energia necessária para que ocorra a mudança de orbital de um elétron situado no topo da banda é da ordem de dezenas de  $eV$ , o que acaba dificultando a condução de eletricidade.

Para um semicondutor, a diferença de energia entre a banda preenchida e a banda vazia é da ordem de  $1eV$ , bastando uma excitação sobre o elétron mais energético para que este alcance novos estados. Neste caso, os buracos também contribuem para o transporte eletrônico. Estes são formados quando elétrons de valência elevam-se à banda de condução deixando ligações covalentes incompletas, bastando uma pequena quantidade de energia para que os demais ocupem a região, desta forma contribuindo para o transporte de carga (NEAMEN, 2002).

A última classe de sistemas possui orbitais semi-preenchidos, o que requer um dispêndio energético ainda menor para que os elétrons excitados transfigurem-se em elementos de condução.

Nas seções seguintes foram relaxadas algumas hipóteses presentes no modelo de Bloch, tais como a presença de desordem na rede e outros tipos de interação.

### 1.2.3 Modelo de Anderson

Em virtude dos problemas decorrentes do estudo de transições entre estados metálicos e isolantes em sólidos, o físico P. W. Anderson, no final da década de 1950, desenvolveu um modelo em que elétrons independentes (não interagentes) movem-se sobre barreiras aleatórias de potencial, sendo estas denominadas desordem do sistema (ANDERSON, 1958; ABRAHAMS *et al.*, 1979; ZALLEN, 2008; LIFSHITZ *et al.*, 1988; KRAMER; MACKINNON, 1993; MOURA, 2003; ELSNER *et al.*, 1999). O objetivo era estudar os estados eletrônicos em sistemas desordenados.

As conclusões obtidas pelo cientista e colaboradores foi a de que, no caso de desordem, a natureza da função de onda pode mudar de estendida (p. ex. função de Bloch) para localizada, o que evidenciaria o caráter isolante do sistema, dado que as amplitudes concentram-se em uma pequena região da rede.

O significado de desordem, no contexto deste trabalho, está ligado a determinadas imperfeições na estrutura e na composição das redes cristalinas. A distribuições aleatórias de átomos diferentes e de lacunas pela rede, bem como a não periodicidade dos elementos constitutivos dessa, são exemplos de sistemas desordenados.

Colocando em termos qualitativos, os potenciais randômicos, tanto no espaço quanto em intensidade, propiciam espalhamento do elétron gerando ondas refletidas e incidentes de fases não coerentes nas barreiras em que a "colisão" ocorre. Isto tem como resultado interferências destrutivas das ondas espalhadas restando consideráveis as amplitudes dos sítios próximos da localização inicial do ente quântico. Quantitativamente, o envelope da função de onda em tal situação possui decaimento exponencial no espaço, ou seja,  $\psi(\mathbf{r}) \sim e^{\left(\frac{r-r_0}{\theta}\right)}$  (LIFSHITZ *et al.*, 1988; KRAMER; MACKINNON, 1993). O termo  $\theta$  é o comprimento de localização.

A representação do sistema pode ser obtida por meio de um hamiltoniano para o elétron atuando em uma cadeia rígida de íons, em que somente estão presentes os potenciais aleatórios dos elementos de rede e as energias cinéticas de translação (*hopping*) entre sítios vizinhos. Em redes unidimensionais, a forma *tight-binding* do hamiltoniano é

$$H_e = \sum_i \epsilon_i D_i^\dagger D_i + \sum_{i \neq j} V_{i,j} (D_i^\dagger D_j). \quad (1.18)$$

onde  $\epsilon_i$  é o potencial aleatório do elemento  $i$ ,  $D_i$  e  $D_i^\dagger$  são, respectivamente, os operadores de aniquilação e de criação do elétron no *locus*  $i$  da rede e  $V_{i,j}$  é a integral de transferência (ou amplitude de *hopping*) entre os sítios  $i$  e  $j$ , que decresce rapidamente à medida que a distância entre os íons aumenta.

Os valores de  $\epsilon_i$  são escolhidos aleatoriamente dentro de um intervalo de largura  $W$ , chamado de largura da desordem. A distribuição de probabilidade da variável aleatória em questão é uniforme dentro do conjunto  $\left[-\frac{W}{2}; \frac{W}{2}\right]$ .

Em sistemas tridimensionais, valores baixos de  $W$  ainda não são suficientes para eliminar as amplitudes dos elétrons estendidas pela rede, prevalecendo o comportamento metálico do sistema. A partir de um valor crítico de  $W = W_c$ , o sistema passa a apresentar caráter isolante, o que significa que somente se verificam estados localizados da função de onda.

Para encontrar os autovalores do hamiltoniano (1.18), empregou-se a expansão dos autoestados na base dos orbitais  $\psi = \sum_i c_i |i\rangle$  na equação de Schrödinger independente do tempo ( $H\psi = E\psi$ ), culminando em:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j V_{ij} c_j \quad (1.19)$$

A compreensão do efeito da desordem sobre a extensão do pacote de onda na eq. (1.19) pode ser dada a partir da análise em dois casos limites e com a simplificação do termo de *hopping*, de modo que sua magnitude seja constante e diferente de zero somente nos vizinhos mais próximos. Nos demais elementos,  $V_{ij} = 0$ . Sob tais condições, a eq. (1.19)

pode ser reduzida a

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + V(c_{i-1} + c_{i+1}) \quad (1.20)$$

No caso em que não há desordem, todas as energias *on-site* ( $\epsilon_i$ ) são iguais, o que permite adotar um referencial em que  $\epsilon_i = 0$  para todo  $i$ . Assim, são obtidos resultados semelhantes ao preconizado pela teoria de Bloch (onda estendida). Para uma rápida visualização, adotou-se  $c_i = c_0 e^{ink}$  como solução de (1.20). Tal feito devolve  $E(k) = 2V \cos(k)$ , o que corresponde à banda cristalina da teoria de Bloch.

A situação oposta ocorre quando  $W \neq 0$  e  $V = 0$ . Não havendo termo cinético, os orbitais deixam de possuir regiões superpostas, fazendo com que o elétron permaneça localizado na região em que seu pacote de onda se encontrava inicialmente.

Baseando-se nas duas ocorrências, seria possível inferir que a formação de estados localizados aparenta ter relação bivariada ( $W$  e  $V$ )? Ao investigar o fato, Anderson verificou, por meio de métodos perturbativos que a transição metal-isolante é governada, em parte, pela razão  $\frac{W}{V}$ . Valores altos do quociente podem implicar a localização do elétron na rede (ANDERSON, 1958).

Com a finalidade de encontrar uma relação quantitativa do grau de localização de um estado  $s$ , Kramer e MacKinnon (1993) propuseram utilizar a razão de participação, grandeza com intervalo de medição  $[1, N]$ , que assume valores mais altos para estados estendidos. Sua expressão matemática possui a forma

$$\xi = 1 / \sum_n |c_n^{(s)}|^4 \quad (1.21)$$

onde  $c_n^{(s)}$  é o coeficiente da função de onda independente do tempo no estado  $s$  e no sítio  $n$  ( $n = 1, \dots, N$ ).

Outras medidas podem ser construídas para a aferição do caráter de cada estado eletrônico, tais como o desvio médio ( $\sigma$ ), conforme eq. (1.22) e o comprimento de localização, este já mencionado anteriormente.

$$\sigma = \sqrt{\sum_m [m - (\sum_n (n) |c_n^{(s)}|^2)]^2 |c_m^{(s)}|^2}. \quad (1.22)$$

Convém lembrar que tais grandezas também podem ser determinadas na dinâmica do elétron, para cada instante  $t$ .

A transição metal-isolante de Anderson é dependente do número de dimensões do sistema estudado. A teoria de escala da localização surgiu a partir de uma reformulação na

teoria de Anderson proposta por Thouless ([EDWARDS; THOULESS, 1972](#); [LICCIARDELLO; THOULESS, 1975](#)). Neste trabalho, foi descrita a formulação apresentada em [Abrahams \*et al.\* \(1979\)](#). A ideia é a de que, em  $T = 0$ , a condutância  $G$  de um sistema desordenado depende de  $L^d$ , onde  $L$  é a escala de comprimento do sistema e  $d$  é o número de dimensões do mesmo.

As grandezas características para o estudo do comportamento dos materiais proposta por Anderson,  $W$  e  $V$ , podem ser mapeadas, respectivamente, em  $\frac{dE}{dN}$ , que é o espaçamento médio entre os níveis de energia e em  $\Delta E$ , representando a média geométrica da flutuação dos níveis de energia causada pela substituição de condições de contorno periódicas por aperiódicas. Para apresentar o cálculo da condutância, segue-se o exposto em [Moura \(2003\)](#), [Dias \(2011\)](#).

No limite macroscópico, existe uma conexão entre  $\Delta E$  e a condutividade elétrica  $\sigma$ . Com o princípio da incerteza, pode-se estabelecer

$$\Delta E = \frac{\hbar}{t_D}, \quad (1.23)$$

onde  $t_D$  é o tempo que um pacote de onda leva para ser difundido até os contornos da caixa de tamanho  $L$ .

Considerando movimento Browniano do elétron no interior da caixa, pode-se escrever

$$t_D = \frac{L^2}{D}, \quad (1.24)$$

onde  $D$  é a constante de difusão. Usando a relação de Einstein entre a condutividade e a difusão, obtém-se

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.25)$$

onde  $e$  é a carga do elétron e  $n(E)$  é a densidade média de estados.

A partir da combinação de (1.23)-(1.25), foi escrita a relação entre  $\Delta E$  e  $\sigma$

$$\Delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))} \quad (1.26)$$

A densidade média de estados pode ser escrita em função do espaçamento entre os níveis de energia  $\frac{dE}{dN}$ :

$$n(E) = \frac{1}{L^d \frac{dE}{dN}} \quad (1.27)$$

Deste modo, Thouless e seus colaboradores chegam ao seguinte resultado, a partir do estudo da relação entre a fórmula de Kubo-Greenwood para a condutância e a resposta à perturbação das condições de contorno na caixa  $L^d$  ([ABRAHAMS \*et al.\*, 1979](#); [LICCIAR-](#)

DELLO; THOULESS, 1975)

$$\frac{V}{W} = \frac{\Delta E}{\frac{dE}{dN}} = \frac{2\hbar}{e^2} G(L) = \frac{2\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2}, \quad (1.28)$$

onde  $G(L)$  é a condutância em um volume  $L^d$ .

Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ( $\Delta E > \frac{dE}{dN}$ ), em contrapartida a estados localizados.

Com o intuito de simplificar a análise, construiu-se a variável  $g(L) = \frac{2\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2}$ . Esta é a condutância adimensional generalizada, ou número de Thouless. De acordo com a teoria da escala, se é conhecida a condutância  $g(L_0)$  em um sistema de tamanho  $L_0$ , é possível obter  $g$  em uma escala diferente,  $L = L_0 b$ . Assim, a condutância de um sistema ampliado depende da condutância do sistema original.

$$g(bL_0) = f(b, g(L_0)). \quad (1.29)$$

A condutância  $g(L)$  Para se ter um conhecimento sobre a variação de  $g(L)$ , torna-se necessário escrever 1.29 em uma quantidade que não seja dependente de escala

$$\frac{d \ln g}{d \ln L} = \beta[g(L)], \quad (1.30)$$

onde  $\beta[g(L)]$  é uma função que depende de  $g(L)$ .

A fim de se compreender o comportamento de  $\beta[g(L)]$ , é necessário investigar as formas de  $g$  em valores extremos. Quando  $g \gg 1$ , o material é um condutor, estando  $g$  no campo de validade da lei de Ohm

$$g \approx \frac{1}{R} = \frac{1}{\rho} \frac{A}{L} = \frac{1}{\rho} \frac{L^{d-1}}{L} \Rightarrow g \approx \sigma_0 L^{d-2}. \quad (1.31)$$

Neste caso, devido à aproximação  $\beta[g(L)] = d - 2 - c \frac{1}{g}$ , onde  $c$  é uma constante. Para a situação oposta ( $g \ll 1$ ), ocorre a localização do elétron fazendo com que condutância esteja limitada a uma região específica da rede, com decaimento exponencial.

$$g \propto e^{-\frac{L}{\theta}} \Rightarrow \beta[g(L)] = -\frac{L}{\theta} = \ln g \quad (1.32)$$

A teoria de escala estabelece um vínculo entre a dimensão do sistema desordenado e o comportamento da condutância no limite termodinâmico. Quando  $\beta > 0$ , a condutância cresce à medida que o tamanho do sistema  $L$  aumenta. Por outro lado ( $\beta < 0$ ),  $g$  decresce com o aumento de  $L$ . Os limites  $\beta > 0$  e  $\beta < 0$  representam dois regimes bem distintos. O caso  $\beta < 0$  representa claramente um regime isolante (com estados localizados) no limite

termodinâmico.

O limite  $\beta > 0$ , por seu turno, relaciona-se à existência de estados metálicos (estendidos pela cadeia). Adiante, tais afirmações foram explicadas.

Em uma rede unidimensional, o valor de  $\beta$  é sempre negativo, portanto, sistemas de maior tamanho implicam condutâncias menores, ou seja, os elétrons, em redes grandes, permanecem localizados.

As cadeias bidimensionais possuem comportamento semelhante ao exposto para o primeiro tipo de cadeia, sendo necessário observar a região assintótica  $\beta \rightarrow 0$ , em que  $g \gg 1$ . Ao integrar  $\beta$ , tem-se:

$$g = g_0 - c \ln \frac{L}{L_0}, \quad (1.33)$$

onde  $L_0$  é o menor tamanho do sistema admissível pela teoria e  $g_0 = g(L_0)$ . Isto significa que, mesmo naquela região, os estados permanecem localizados.

As consequências mais intrigantes da teoria estão no caso tridimensional, pois  $\beta$  pode ser tanto positivo (para  $g \gg 1$ ) como negativo (para  $g \ll 1$ ). Há um valor  $g = g_c$  denominado condutância crítica e ocorre quando  $\beta = 0$ . Tal ponto, instável, indica que aquela medida é independente do tamanho do sistema. Logo, para  $g > g_c$ , o sistema possui estados estendidos, pois  $g$  aumenta com  $L$ . Quando  $g < g_c$ , os estados tornam-se localizados, pelo motivo inverso. Assim, fica caracterizada a possibilidade de existirem condutores e isolantes com desordem para redes tridimensionais, o que não ocorre nos outros dois casos.

## 1.3 Efeitos de interação

Nesta seção foram apresentados outros fatores, distintos das relações já estudadas entre elétrons e íons, que também interferem no processo de transporte de carga. A lista não é exaustiva, contudo, é suficiente para a compreensão dos sistemas estudados ao longo da obra.

### 1.3.1 Campo elétrico

De acordo com F. Bloch (BLOCH, 1929), a descrição de um elétron em um cristal ordenado e com potencial periódico é dada por meio de uma onda plana modulada por uma função periódica. Em tal sistema, existem regiões energéticas permitidas para a existência do ente (bandas) (MORSE, 1930). Deste modo, somente pode haver conjuntos limitados de vetores de onda  $\mathbf{k}$  no sistema. Esses grupos são denominados zonas de

Brillouin.

Em consonância com o exposto na seção 1.2.2, o rol de energias permitidas depende de  $\mathbf{k}$ . Ao se inserir um campo elétrico constante, a força decorrente proporciona o aumento da intensidade de  $\mathbf{k}$  ao longo do tempo carregando o ente quântico para estados com maior energia. Todavia, o incremento não pode ser ilimitado, por haver limites permitidos para o vetor de onda no interior do cristal. Destarte, ao ganhar energia suficiente para ultrapassar o topo da banda, o elétron sofre uma reflexão de Bragg, limitado seu movimento à zona reduzida de Brillouin.

As demonstrações matemáticas de tal fenômeno podem ser vistas, sob diferentes aspectos em Bloch (1929), Zener (1934), Hartmann *et al.* (2004). Em linhas gerais, o modelo de dinâmica eletrônica em uma rede harmônica, com campo elétrico de intensidade  $F$ , atuando paralelamente a ela, pode ser descrito pelo hamiltoniano clássico

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - e\mathbf{F}\mathbf{r} \quad U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.34)$$

Aplicando as equações de Hamilton ( $\mathbf{v} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}$  e  $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}$ ) para a eq. 1.34 e, em seguida, "quantizando" o momento do elétron ( $\mathbf{p} \rightarrow \hbar\mathbf{k}$ ), obtém-se

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad (1.35)$$

$$\dot{\mathbf{k}} = \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \quad (1.36)$$

onde  $\epsilon(\mathbf{k})$  é a energia do elétron livre e  $e$  é a carga absoluta deste.

Conforme a eq. 1.36, a taxa de variação de  $\mathbf{k}$  é igual à força elétrica dividida por  $\hbar$ , o que leva a

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \frac{e\mathbf{F}}{\hbar}t. \quad (1.37)$$

Portanto, o valor de  $\mathbf{k}$  aumenta uniformemente com  $t$ . Não obstante, já foi mencionado que o crescimento do vetor de onda é limitado pelas zonas de Brillouin.

Em um cristal unidimensional, o intervalo permitido de valores de  $k$  é  $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ , onde  $a$  é o período do potencial da rede. Então, quando o elétron chega até  $k = \frac{\pi}{a}$ , este sofre reflexão de Bragg, reaparecendo instantaneamente em  $k = -\frac{\pi}{a}$  e seguindo com sua dinâmica no sentido do incremento de  $k$ .

Com base na eq. (1.35) e na periodicidade da função  $\epsilon(\mathbf{k})$  para o cristal, a velocidade do elétron oscila em  $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ .

O período da oscilação é  $\tau_{osc} = \frac{2\pi\hbar}{eFa}$  e seu comprimento é  $L = -\frac{1}{eF}[\epsilon(\frac{\pi}{a}) - \epsilon(-\frac{\pi}{a})]$ . Após um ciclo ( $t = \tau_{osc}$ ), o elétron retorna a sua posição inicial.

### 1.3.2 Interação elétron-fônon e ondas acústicas de superfície

Em linhas gerais, a interação elétron-fônon se faz por uma abordagem aproximada, que tem por objetivo principal considerar os efeitos do movimento atômico sobre o transporte de carga.

Os elementos da rede possuem mobilidade baixa em relação ao elétron, dado que, em baixas temperaturas, a frequência de oscilação do segundo ente é cerca de 100 vezes superior à do primeiro. Deste modo, os íons movimentam-se em torno de seus pontos de equilíbrio. Apesar do deslocamento limitado, as vibrações da rede influenciam na dinâmica eletrônica, caracterizando as interações elétron-fônon. Tal fenômeno torna a equação de Schrödinger não linear, e esta mostra-se adequada para descrever o sistema, tanto para fônons acústicos quanto para fônons ópticos (YAMADA; IGUCHI, 2010; DATTA; KUNDU, 1996).

Estudos iniciais em que a equação foi desenvolvida a partir das relações entre elétron e rede foram propostos por Holstein (HOLSTEIN, 1959a; HOLSTEIN, 1959b). O autor analisou uma cadeia cristalina de  $N$  sítios, unidimensional e com interação elétron-rede. O hamiltoniano do sistema foi dado por

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{2M} \hat{P}_j^2 + \frac{M\omega^2}{2} \hat{X}_j^2 + J(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + \epsilon_j c_j^\dagger c_j + A \hat{X}_j c_j^\dagger c_j \right], \quad (1.38)$$

onde  $\hat{X}_j$  é o operador posição do elemento  $j$  da rede,  $\hat{P}_j$  é o operador momento em  $j$ ,  $J$  é o termo de *hopping* entre vizinhos mais próximos,  $c_j^\dagger$  e  $c_j$  são, respectivamente, os operadores de criação e de aniquilação do elétron no *locus*  $j$  da rede,  $\epsilon_j$  é a energia local do sítio  $j$  e  $A$  é um parâmetro associado à energia eletrônica nos sítios da rede.

A solução do problema, na aproximação adiabática, inicia-se pela suposição de que o estado do sistema é dado por uma combinação de funções ( $|\phi\rangle$ ) de onda em cada sítio:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^N a_j(x_1, x_2, \dots, x_N) |\phi_j\rangle, \quad (1.39)$$

onde a base  $|\phi_j\rangle$  é ortonormal.

Aplicando o desenvolvimento de (1.38) de acordo com Holstein (1959a), Dias (2011),

no estado  $|\psi\rangle$ , encontra-se o valor esperado do hamiltoniano no estado  $|\psi\rangle$ .

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{A^2}{2M\omega^2} |a_j|^4 + Ja_j^*(a_{j+1} + a_{j-1}) \right], \quad (1.40)$$

e a equação não linear de Schrödinger

$$i\hbar a'_j(t) = J[a_{j+1}(t) + a_{j-1}(t)] - \chi |a_j(t)|^2 a_j(t), \quad (1.41)$$

onde  $\chi = \frac{A^2}{M\omega^2}$

Outros trabalhos, por sua vez, visaram a estudar as interações elétron-fônon inserindo acoplamento via termo de *hopping*. A construção matemática de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) (SU *et al.*, 1979; SU *et al.*, 1980), para analisar o comportamento das alterações específicas no poliacetileno, conseguiu, com considerável sucesso, introduzir a dinâmica atômica e investigar a dinâmica eletrônica neste ambiente.

O modelo SSH é um modelo descrito por um hamiltoniano harmônico similar ao apresentado na eq. 1.38. Entretanto, vale salientar duas diferenças fundamentais entre o SSH e a abordagem de Holstein: 1) o modelo SSH contém energia diagonal estática, descrita pela distribuição atômica e o tempo de *hopping* é descrito por uma forma funcional dependente da posição atômica dos vizinhos; 2) enquanto o modelo de Holstein consiste em uma única equação de Schrödinger não linear efetiva, o modelo SSH considera duas equações: a dinâmica eletrônica através da equação de Schrödinger e a dinâmica da rede através da equação de Hamilton.

Ou seja, no modelo SSH tem-se a oportunidade de acompanhar, por meio de expressões distintas, a dinâmica da rede e o transporte de carga. Como mencionado anteriormente, um dos pontos importantes do SSH é a elaboração do termo de *hopping*. Diferente do termo  $J$  apresentado na eq. 1.38), na teoria SSH o termo de *hopping* não é constante; a energia de interação entre os primeiros vizinhos  $n$  e  $m$  ( $t_{n,m}$ ) depende linearmente da deslocamento relativo dos átomos nas posições  $n$  e  $m$ . Desta feita, o termo de acoplamento entre o elétron e a rede fica, na teoria SSH, inserido por meio do vínculo entre a energia de *hopping* e a posição relativa dos primeiros vizinhos.

Na abordagem SSH, o termo de *hopping* diminui a medida que os átomos se distanciam; por outro lado, átomos próximos apresentam *hopping* maior. Os autores consideraram que tal termo seria proporcional à distância entre átomos vizinhos ( $t_{n,m} \approx 1 - \alpha(x_n - x_m)$ ). Assim, a rede em equilíbrio ( $x_n - x_m = 0$ ) é representada por átomos acoplados com termos de *hopping* constantes e iguais a 1. Quando  $(x_n - x_m) < 0$ , os átomos vizinhos estão próximos e, portanto, com *hopping* forte; para  $(x_n - x_m) > 0$ , átomos ficam distantes e, em consequência, apresentam *hopping* fraco ( $< 1$ ). Usando esta abordagem, os autores

resolveram, de forma separada, a dinâmica da rede e a do elétron, considerando o acoplamento dos entes. O modelo SSH (SU *et al.*, 1979; SU *et al.*, 1980) teve considerável sucesso para entender o transporte de carga em polímeros longos como o trans-poliacetileno.

A abordagem proposta no trabalho SSH abriu um grande leque de possibilidades dentro do *framework* de modelos com interações elétron-fônon. Um dos pontos importantes da abordagem SSH foi a utilização de uma aproximação harmônica para o acoplamento inter-atômico. Ou seja, na teoria proposta por Su-Schrieffer-Heeger, os átomos são acoplados por molas "simples", que obedecem a lei Hooke. Esta consideração, apesar de ser suficiente para representar as vibrações atômicas em baixa temperatura, não passa de uma simplificação.

Em alguns trabalhos recentes do prof. M. G. Velarde, uma abordagem análoga ao SSH foi proposta, acrescida da consideração de uma rede não-harmônica (VELARDE, 2010; CHETVERIKOV *et al.*, 2012). Em boa parte de seus estudos analíticos e numéricos, Velarde e colaboradores usaram uma rede de Morse. A rede de Morse é representada por um potencial exponencial cuja a primeira aproximação é o modelo não linear de Fermi-Pasta Ulam (VELARDE, 2010). Outra diferença importante entre a abordagem de Velarde e o modelo SSH foi a definição do termo de *hopping*. Para o caso com rede não linear, foi utilizado  $t_{n,m} = e^{[-\alpha(x_n - x_m)]}$  (VELARDE, 2010; CHETVERIKOV *et al.*, 2012).

Tal abordagem é equivalente ao caso SSH para pequenos deslocamentos, entretanto, ela oferece possibilidade de uma descrição mais eficiente, quando vibrações não lineares estão presentes. O principal resultado encontrado por Velarde e colaboradores foi o forte acoplamento entre as vibrações solitônicas existentes na rede de Morse e o pacote eletrônico. Em linhas gerais, os solitons de alta velocidade de propagação aprisionam o elétron arrastando o mesmo ao longo da rede com poucos termos dissipativos.

Outro ponto relevante dentro dos estudos de interação elétron-fônon (seja via teoria SSH ou inclusive via abordagens semelhantes) é considerar a incidência de ondas acústicas de superfícies (SAW).

Vale salientar que este tipo de onda (SAW) vem sendo estudado com bastante ênfase na literatura atual (SHILTON *et al.*, 1996a; SHILTON *et al.*, 1996b; MCNEIL *et al.*, 2011).

Alguns trabalhos recentes mostraram a possibilidade de controlar o movimento eletrônico entre dois pontos quânticos (MCNEIL *et al.*, 2011). Usando basicamente a incidência de SAW, os autores causaram um movimento tipo "ping-pong" entre os dois pontos quânticos. Entretanto, vale salientar que nenhuma explicação teórica detalhada e definitiva foi ofertada para este fenômeno observado experimentalmente. Do ponto de vista teórico, é possível modelar o bombeamento de SAW considerando, por exemplo, uma das extremidades do material preso a um oscilador simples (esta é uma das formas de simular o bombeamento de SAW).

Neste trabalho foram explorados diretamente estes problemas. Considerou-se, teoricamente, a presença de SAW, campos elétricos, interação elétron-fônon e desordem para que fosse investigado, em detalhe, o transporte de carga sob essas condições.

No capítulo 2, foi estudado o problema da rede de Morse dentro da abordagem descrita por Velarde ([VELARDE, 2010](#); [CHETVERIKOV \*et al.\*, 2012](#)), acrescido do termo de campo elétrico estático. No capítulo 3, observou-se uma representação semelhante a modelo harmônico SSH, além de ter sido introduzida a desordem estrutural, bem como a presença de ondas acústicas.

# 2 REDE DE MORSE COM CAMPO ELÉTRICO

## 2.1 Introdução

Neste capítulo, foram estudadas as interações entre um tipo de sistema elétron-rede não linear de baixa dimensionalidade ( $D = 1$ ), com número total de sítios  $N$  e um campo eletrostático aplicado paralelo à rede. Foi induzido, neste sistema, um modo solitônico e foi verificada sua influência, em conjunto com o aludido campo, sobre o transporte eletrônico. Convém lembrar que a rede possui tratamento matemático associado à mecânica clássica, enquanto que a descrição do elétron foi feita com a teoria quântica. Vale, ainda, observar que, salvo disposição em contrário, explícita no texto, foram tomados como sinônimos os termos elemento de rede, átomo e íon.

## 2.2 O Modelo

Nesta seção foi apresentado o modelo e o método numérico empregado para resolvê-lo. A rede é composta de elementos de massa unitária ( $m_n = 1$ ) distribuídos ao longo de uma linha. Estes interagem entre si, por meio de um tipo de força não harmônica. A energia potencial associada, denominada potencial de Morse atua em relação aos elementos vizinhos próximos, de acordo com a eq. (2.1)

$$U_{n,n-1} = C_1 \left\{ 1 - \exp[-C_2(q_n - q_{n-1})] \right\}^2. \quad (2.1)$$

De acordo com [Henning \*et al.\* \(2007\)](#),  $q_n$  é o deslocamento do ente localizado no sítio  $n$ ,  $C_1$  representa a energia típica de ligação e  $C_2$  é um parâmetro de alcance do referido potencial.

Cada elemento  $n$  da rede possui energia cinética, dada por  $\frac{p_n^2}{2m_n}$  e, desta forma, com

base em [Henning \*et al.\* \(2007\)](#), determinou-se o modelo do hamiltoniano da rede

$$H_{\text{lattice}} = \sum_n \frac{p_n^2}{2m_n} + C_1 \left\{ 1 - \exp[-C_2(q_n - q_{n-1})] \right\}^2, \quad (2.2)$$

onde  $p_n$  é o momentum. Neste trabalho, foram efetuadas transformações adimensionais nas grandezas envolvidas com o intuito de que fossem suprimidas as constantes, conforme apresentado por [Henning \*et al.\* \(2007\)](#):  $q_n \rightarrow C_2 q_n$ ;  $p_n \rightarrow p_n/\sqrt{2C_1}$  e  $H_{\text{lattice}} \rightarrow H_{\text{lattice}}/(2C_1)$ .

Por sua vez, o elétron livre, que percorre a rede, tem seu hamiltoniano composto de dois termos ([HENNING \*et al.\*, 2007](#))

$$H_e = \sum_n [(n - N/2)eE] D_n^\dagger D_n + \sum_n V_{n,n-1} D_n^\dagger (D_{n-1} + D_{n+1}). \quad (2.3)$$

em que  $D_n^\dagger$  e  $D_n$  são, respectivamente, os operadores de criação e de aniquilação para o elétron no sítio  $n$ ,  $eE$  representa a força elétrica que atua sobre a carga  $e$  e  $V_{n+1,n}$  é a amplitude de *hopping*.

O primeiro termo do hamiltoniano é relativo à energia potencial elétrica (interação elétron-campo) ( $[(n - N/2)eE] D_n^\dagger D_n$ ); e o segundo corresponde às interações entre a amplitude de probabilidade em  $n$  e os sítios vizinhos  $n - 1$  e  $n + 1$  ( $V_{n+1,n} (D_{n+1}^\dagger D_n)$ ). O termo  $-eEN/2$  é uma constante, que não altera os cálculos das grandezas de interesse. Este não passa de um artifício empregado para que se evite trabalhar com números de ordens de grandeza muito discrepantes, o que prejudicaria os resultados obtidos a partir do procedimento computacional utilizado.

Convém lembrar que há energia de interação entre a amplitude de probabilidade do elétron no sítio  $n$  e o próprio núcleo  $n$ , energia *on-site*, dada por  $\epsilon_n D_n^\dagger D_n$ . Todavia, os elementos da rede são idênticos, tornando o valor constante, o que pode, por convenção ( $\epsilon_n = 0$ ), tal termo ser abolido da expressão do hamiltoniano do elétron.

O *hopping*  $V_{n+1,n}$  depende da distância relativa entre duas moléculas consecutivas da cadeia  $V_{n+1,n} = -V \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]$ . O valor  $\alpha$  representa o grau de influência do deslocamento relativo (em unidades de espaçamento de rede) em  $V_{n+1,n}$ , ou seja, determina a força do acoplamento rede-elétron (em unidade de  $1/C_2$ ). Para deslocamentos pequenos, o termo converge para o exposto na aproximação SSH:  $V_{n+1,n} \approx -V[1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)]$  ([SU \*et al.\*, 1979](#)). No espaço dos elementos da rede, pode-se representar a função de onda do elétron dependente do tempo da seguinte forma  $|\Phi(t)\rangle = \sum_n f_n(t)|n\rangle$ , onde  $f_n(t)$  é a amplitude de Wannier. Isto significa que a probabilidade de se encontrar o elétron no sítio  $n$  é dada por  $|f_n(t)|^2$ . Inicialmente, o elétron foi inserido no sítio  $N/2$ .

Desta forma, tem-se  $|\Phi(t=0)\rangle = \delta_{n,N/2}|n\rangle$ .

A fim de se obter a equação da dinâmica do elétron, basta escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo utilizando o hamiltoniano do elétron ( $H_e$ ) e a notação *ket*.

$$i\hbar \frac{d|\Phi(t)\rangle}{dt} = H_e |\Phi(t)\rangle \quad (2.4)$$

Em seguida, foi obtida a equação em termos dos orbitais  $f_n(t)$  e foram separadas cada uma das componentes  $|n\rangle$  em novas equações do tipo

$$\begin{aligned} \hbar i \frac{df_n(t)}{dt} &= [(n - N/2)eE]f_n(t) - V \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]f_{n+1}(t) \\ &- V \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]f_{n-1}(t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para a resolução do problema, foi necessário tornar as grandezas calculadas adimensionais, conforme proposto por Henning *et al.* (2007). Assim, adotou-se  $\hbar = 1$  e uma mudança na escala temporal foi realizada de modo a incluir a frequência correspondente às oscilações harmônicas em torno do potencial de Morse mínimo ( $\Omega$ ). Ao se realizar a mudança  $t \rightarrow \Omega t$ , a equação (2.5) torna-se

$$\begin{aligned} i \frac{df_n(t)}{dt} &= [(n - N/2)F]f_n(t) - \tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]f_{n+1}(t) \\ &- \tau \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]f_{n-1}(t) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Onde  $\tau = V/(\hbar\Omega)$  representa a diferença de escala temporal entre a dinâmica do elétron e as vibrações da rede e  $F = eE/(\hbar\Omega)$  é um campo elétrico adimensional. A dinâmica da rede pode ser encontrada por meio da formula de Hamilton  $\frac{dp_n(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_n(t)}$ . Como  $H = H_e + H_{\text{lattice}}$  e  $H_e$  é um operador quântico, torna-se imperativo determinar seu valor esperado a fim de aplicá-la corretamente ao caso. Logo,  $H = \langle \Phi(t) | H_e | \Phi(t) \rangle + H_{\text{lattice}}$  e, em consequência, a dinâmica da rede é

$$\begin{aligned} \frac{d^2 q_n(t)}{dt^2} &= \{1 - \exp[-(q_{n+1} - q_n)]\} \exp[-(q_{n+1} - q_n)] \\ &- \{1 - \exp[-(q_n - q_{n-1})]\} \exp[-(q_n - q_{n-1})] \\ &+ \alpha V \{ (f_{n+1}^* f_n + f_{n+1} f_n^*) \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)] \\ &- (f_n^* f_{n-1} + f_n f_{n-1}^*) \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})] \} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Dada a descrição da dinâmica do sistema, apresentam-se, a seguir, os métodos numéricos empregados para a solução do caso.

A evolução temporal dos estados de um sistema quântico, para intervalo de tempo infinitesimal, é dada pelo operador  $U(t_o + dt; t_o) = 1 - \frac{iH_e dt}{\hbar}$  conforme apresentado em

Sakurai (1994). Para intervalos maiores, procede-se à relação  $U(t + dt; t_o) = U(t + dt; t)U(t; t_o)$ . A partir deste resultado, é possível determinar a equação de Schrödinger para a evolução temporal cuja solução, para um hamiltoniano independente do tempo, é:  $U(t; t_o) = \exp[-iH_e(t - t_o)]$ .

Em sua forma final, a dinâmica do elétron torna-se  $|\Phi(t + \delta t)\rangle = U(\delta t)|\Phi(t)\rangle$ .

Nos trabalhos de Sales e Moura (2014), Moura (2011) foi determinado um procedimento numérico com base na expansão em série de Taylor do operador de evolução temporal dado por:

$$U(\delta t) = \exp(-i\tilde{H}_e\delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} \frac{(-i\tilde{H}_e\delta t)^l}{l!} \quad (2.8)$$

onde  $\tilde{H}_e$  é o hamiltoniano do elétron (eq. 2.3) com *hopping* normalizado  $\tilde{V}_{n+1,n} = -\tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]$ .

A obtenção  $\tilde{H}_e^l$  no estado  $|\Phi(t)\rangle$  deu-se por meio do uso de uma fórmula recursiva. Seja  $Z_n$  um operador aplicado em  $|n\rangle$ , tal que  $\tilde{H}_e|\Phi(t)\rangle = \sum_n Z_n|n\rangle$ . Sua expressão é:

$$\begin{aligned} Z_n &= [(n - N/2)F]f_n(t) \\ &- \{\tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]\}f_{n+1}(t) \\ &- \{\tau \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]\}f_{n-1}(t) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Para o hamiltoniano eletrônico com expoente 2 aplicada no estado  $|\Phi(t)\rangle$ , obtém-se  $\tilde{H}_e^2|\Phi(t)\rangle = \tilde{H}_e \sum_n Z_n|n\rangle$ . Em consequência, para o expoente  $l$ , tem-se  $\tilde{H}_e^l|\Phi(t)\rangle = \tilde{H}_e \sum_n Z_n^{l-1}|n\rangle$ . Assim, é possível encontrar  $Z_n^l$ , como evidenciado em (2.10)

$$\begin{aligned} Z_n^l &= [(n - N/2)F]Z_n^{l-1} \\ &- \{\tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]\}Z_{n+1}^{l-1} \\ &- \{\tau \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]\}Z_{n-1}^{l-1}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

Como  $\tilde{H}_e^l|\Phi(t)\rangle = \sum_n Z_n^l|n\rangle$ , esta igualdade pode ser aplicada a cada termo da expansão de (2.8) para que, em seguida, seja calculado o estado  $|\Phi(t + \delta t)\rangle = \sum_n f_n(t + \delta t)|n\rangle$ .

Por sua vez, as equações que regem o comportamento da rede unidimensional (2.7) foram resolvidas por meio do método de segunda ordem de Euler, de acordo com o apresentado em Hairer *et al.* (1987). Tal método implica utilizar, em primeiro passo, o procedimento padrão de Euler como uma estimativa a ser empregada para diminuir o erro do resultado numérico desenvolvido no segundo passo. Assim, aquela em  $t + \delta t$ ,  $q_n(t + \delta t)^*$ ,

é dada por:

$$q_n(t + \delta t)^* \approx q_n(t) + \delta t \left. \frac{dq_n}{dt} \right|_t \quad (2.11)$$

E o valor mais preciso do deslocamento relativo,  $q_n(t + \delta t)$  é obtido por meio da fórmula de ajuste:

$$q_n(t + \delta t) \approx q_n(t) + \frac{\delta t}{2} \left[ \left. \frac{dq_n}{dt} \right|_t + \left. \frac{dq_n^*}{dt} \right|_{t+\delta t} \right] \quad (2.12)$$

Utilizando recursivamente (eq. 2.11 e 2.12), encontra-se um valor aproximado de  $q_n(t)$ . Para este problema, foi utilizado um passo  $\delta t = 10^{-3}$  e a expansão apresentada na eq. (2.8) foi truncada em  $n_o = 15$ . O modo solitônico foi inserido na rede por meio da condição inicial  $\left. \frac{dq_n(t)}{dt} \right|_t = \delta_{n,N/2}$ .

Ao longo dos intervalos de tempo estudados para este sistema, o controle de erro dado pela diferença entre a norma da função de onda do elétron e a unidade, foi inferior a  $10^{-10}$ . Tal controle é um indicativo da acurácia do método numérico utilizado. De modo a proceder a uma segunda verificação dos resultados de  $q_n(t)$  encontrados pelo procedimento de Euler, foi aplicado também o receituário de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) conforme Hairer *et al.* (1987). Ressalta-se que, após a aplicação destes, as diferenças entre  $\{q_n^E(t)\}$  e  $\{q_n^{RK4}(t)\}$  mostraram-se inferiores a  $10^{-8}$ . Uma vantagem do uso do método de Euler, em detrimento de RK4, conjugado com o procedimento da expansão truncada da série de Taylor é o gasto de tempo de máquina para executar a tarefa: aquele demora, em média, um terço do tempo despendido pelo formalismo RK4-Taylor.

Em trabalhos anteriores, como em Lima e Silva (2006), Silva *et al.* (1996), Jr *et al.* (2015), a equação da dinâmica de rede foi resolvida utilizando o método de Euler de primeira ordem enquanto que a parte eletrônica, por se tratar de um sistema com elétrons interagentes, foi resolvida por meio de um operador de evolução baseado no cálculo de uma coleção de autovalores e de autovetores de elétrons isolados a partir do hamiltoniano do problema.

Para cadeias longas, o processo de diagonalização de matrizes para cada passo torna-se muito lento em relação ao método de expansão do operador temporal em série de Taylor.

## 2.3 Resultados e Discussão

Retomando alguns pontos da seção anterior, em todos os ensaios realizados, a condição inicial implicou dispor o elétron ao centro da cadeia (i.e.  $\{f_n(t=0) = \delta_{n,N/2}\}$ ) e forçar um modo solitônico, com  $p_n = \delta_{n,N/2}$  e  $q_n = 0$ .

Torna-se mister evidenciar o procedimento para evitar efeitos de borda no sistema. Assim, toda vez que a probabilidade de se encontrar o elétron nas extremidades da cadeia

fosse superior a  $10^{-30}$ , sua extensão foi ampliada de dez elementos a partir de cada uma das margens.

Os parâmetros do modelo foram fixados com base na justificativa fornecida por [Henning et al. \(2007\)](#) de que os valores representavam uma aproximação razoável para a modelagem de biomoléculas. Logo,  $\tau = 10$ ,  $\alpha = 1.75$  e  $V = 0.1$ .

De início, foi replicado o trabalho de [Henning et al. \(2007\)](#) em que considera  $F = 0$ , ou seja, a ausência de campo elétrico externo à rede, com dois objetivos: o primeiro está relacionado à visualização da formação do *solectron* (par elétron-soliton) e o segundo repousa em mais uma oportunidade para validar o método numérico adotado. A dinâmica da rede, bem como a do elétron, foram esquematizadas nos diagramas da figura 2.1.

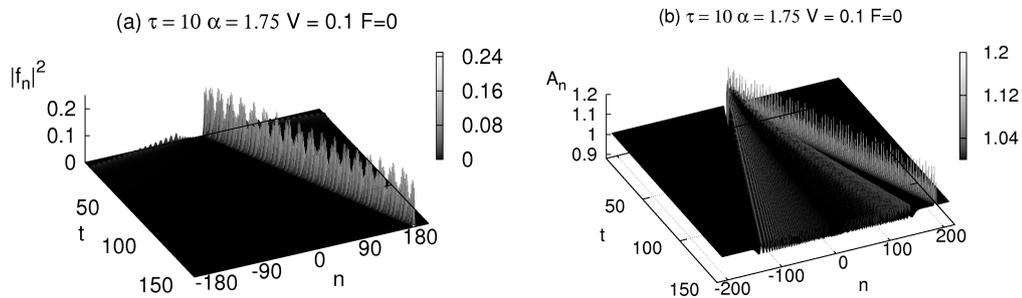


FIGURA 2.1 – (a) Valor absoluto ao quadrado da componente da função de onda no sítio  $n$ ,  $|f_n|^2$  versus  $t$  e  $n$  para  $\alpha = 1.75, \tau = 10, V = 0.1$  e  $F = 0$ . (b) Deformação da rede  $A_n$  para situação equivalente a (a).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Observando o diagrama da esquerda (figura 2.1(a)), foi possível detectar o deslocamento do pacote de onda do elétron no sentido dos elementos de rede com numeração positiva. O mesmo ocorreu com as regiões em que se concentravam as maiores deformações de rede (figura 2.1(b)). Esta grandeza foi obtida em função dos deslocamentos relativos das partículas  $q_n$  caracterizando-se pela expressão  $A_n = \exp[-(q_n - q_{n-1})]$ . Desta forma, o ente com tratamento quântico permaneceu capturado em uma fração finita da rede, movendo-se por ela ao longo de todo o intervalo analisado. Concomitantemente, verifica-se a propagação da energia de deformação em modo solitônico ao longo da rede.

Um detalhe visível no diagrama (a) da figura 2.1 é a ocorrência pequenos picos de  $|f_n|^2$  fora do centro da rede. Estes picos representam a dispersão do pacote de onda ao longo da rede. O mesmo tipo de ocorrência se deu nos trabalhos de M. G. Velarde ([CHETVERIKOV et al., 2011](#); [HENNIG et al., 2008](#); [HENNING et al., 2007](#); [MAKAROV et al., 2006](#)).

Os resultados obtidos para  $F = 0$  estão de acordo com aqueles reportados em [Henning et al. \(2007\)](#). Configura-se um indício de acurácia do método numérico empregado neste

trabalho.

Adiante, foram calculadas duas medidas para auxiliar a compreensão do transporte eletrônico em rede não harmônica. A primeira é a posição esperada do elétron, denominada centróide. E a segunda é a função de participação, que representa uma medida da difusão do pacote de onda ao longo da rede. Utilizando as definições presentes em Sales e Moura (2014), Santos *et al.* (2015), as expressões encontradas são, respectivamente:

$$\langle n(t) \rangle = \sum_n (n - N/2) |f_n(t)|^2 \quad (2.13)$$

e

$$\xi(t) = 1 / \sum_n |f_n(t)|^4. \quad (2.14)$$

Sobre o centróide, este foi calculado tendo como origem a posição do elemento central da cadeia (representado pelo termo  $N/2$ ).

O entendimento da participação como *proxy* da medida de variância do pacote de onda é obtido a partir da observação de seus valores extremos: para um pacote concentrado em um único sítio  $k^*$ ,  $|f_{k^*}(t)|^2 = 1$ , portanto,  $\xi(t) = 1$ ; e  $\xi(t) = N$  para a situação em que  $|f_n(t)|^2 = \frac{1}{N}$  em todos os elementos da rede. No caso  $F = 0$ , ao se observar o

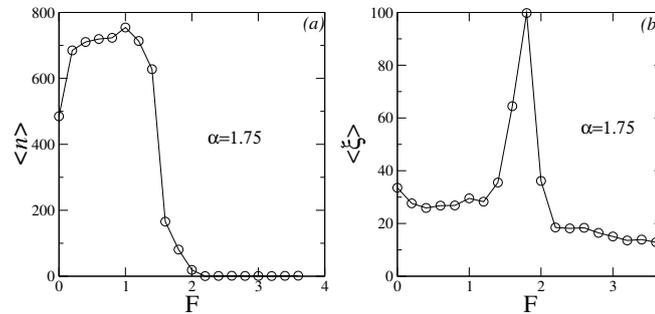


FIGURA 2.2 – a) Posição esperada do elétron (centróide) (a) e participação (b) para tempo elevado versus intensidade do campo elétrico  $F$ .

Fonte: Elaborado pelo autor.

perfil topológico apresentado na figura 2.1 (a), a participação permaneceu constante e o centróide teve seu valor crescente durante o intervalo analisado.

Para a compreensão da dinâmica dos entes do sistema sob a condição  $F > 0$ , foram utilizados os mesmos parâmetros adotados no cálculo para  $F = 0$ . Foi construída a figura 2.2 em que se determinaram os valores do centróide e da participação do elétron em tempo longo para diferentes valores de  $F$ . Ambas as medidas foram obtidas a partir de

uma média temporal calculada no limite de tempo longo, a saber

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \frac{1}{N_{tempo}} \sum_{t=0.8t_{max}}^{t_{max}} \langle n(t) \rangle \\ \langle \xi \rangle &= \frac{1}{N_{tempo}} \sum_{t=0.8t_{max}}^{t_{max}} \langle \xi(t) \rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde  $t_{max} = 2 \times 10^3$  e  $N_{tempo} = \frac{0.2t_{max}}{\delta t}$ . Quando  $F < 2$ , o elétron aparentemente é conduzido ao longo da rede, pois  $\langle n \rangle$  possui valores muito maiores que zero no referido intervalo. Em contrapartida, há aprisionamento do ente quando  $F > 2$  (figura 2.2(a)).

Se uma partícula está confinada em um potencial periódico em conjunto com uma força externa constante, então surge um fenômeno denominado oscilação de Bloch. Este implica que o elétron oscila em torno de uma posição fixa do sistema. Todavia, para o problema analisado, pareceu haver uma competição entre o par elétron soliton e o campo elétrico. Quando o campo é fraco, tende a prevalecer o estado em que o elétron é aprisionado ao soliton e é conduzido por este ao longo da rede. A oscilação de Bloch parece ser verificada somente em campos elevados ( $F > 2$ ), quando o ente aparenta ter sua posição esperada em tempo longo aproximadamente igual a zero.

A função de participação (figura 2.2(b)) apresentou valores inferiores a 40 para  $F \leq 1,5$  e  $F > 2$ . Nesta região, o pacote de onda permaneceu, majoritariamente, agregado ao soliton ( $F \leq 1,5$ ) ou oscilando em torno da posição inicial ( $F > 2$ ). No caso em que  $1,5 < F < 2$ , ocorreu uma divisão na distribuição de probabilidade do elétron ao longo da rede em duas partes não desprezíveis: a primeira está concentrada em torno da posição inicial e a outra está associada à dinâmica do par elétron-soliton. O maior valor observado para a participação ocorreu para  $F \approx 1.8$  conforme apresentado na figura 2.2(b).

Um análise mais detalhada relativa ao comportamento do pacote de onda e à deformação da rede para  $0 < F < 2$  foi feita com base no conteúdo descrito pelas figuras 2.3 e 2.4. Utilizando os mesmos parâmetros ( $\tau = 10$ ,  $\alpha = 1.75$  e  $V = 0.1$ ), para o caso  $F = 0.5, 1$ , (figura 2.3) verificou-se que a função de onda ficou dividida em duas partes: a fração maior estava aprisionada ao soliton enquanto uma pequena parte permaneceu oscilando em torno da posição inicial da rede. Pode-se supor que o par eletron-soliton surgiu a partir das interações de Morse e do acoplamento elétron-fônon. Ademais, a deformação da rede  $A_n$  mostrou-se de caráter solitônico, sofrendo pequenas alterações devido à influência do campo externo, que modificou ligeiramente o último termo da equação (2.7). Este representa a força resultante da interação elétron-rede, e as aludidas variações em sua magnitude implicam pequenas diferenças na distribuição das deformações de rede.

Na figura 2.4, foi exposta a evolução temporal de  $|f_n(t)|^2$  e  $A_n$  ao longo da rede para  $F = 1,8$  e para  $F = 2$ . Na primeira situação (figura 2.4 (a,c)), uma grande proporção

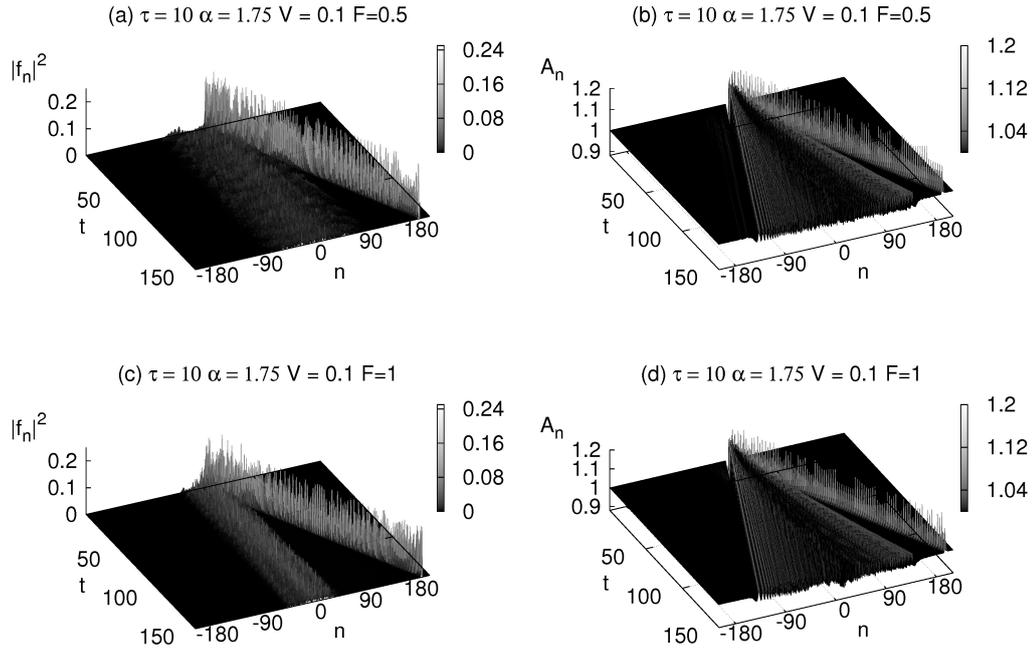


FIGURA 2.3 – (a,c) Valor absoluto ao quadrado da componente da função de onda no sítio  $n$ ,  $|f_n|^2$  versus  $t$  e  $n$  para  $\alpha = 1.75, \tau = 10, V = 0.1$  e  $F = 0.5, 1$ . (b,d) Deformação da rede  $A_n$  para situação equivalente a (a,c).

Fonte: Elaborado pelo autor.

da densidade de probabilidade eletrônica ficou localizada em torno da posição inicial. A menor parte, aparentemente, continuou capturada pelo modo solitônico, contrariando os eventos em que  $F \lesssim 1.5$  exemplificados, neste trabalho, por dois valores de  $F$  (ver figura 2.3). Tal ocorrência explica o aumento da função de participação no intervalo  $1, 5 < F < 2$ . Tomando o segundo caso (figuras 2.4 (b,d)), o elétron ficou localizado em torno da posição inicial para o termo de acoplamento  $\alpha = 1, 75$ . O mesmo ocorreu para valores de  $F > 2$ .

O processo de competição entre o campo elétrico e as vibrações da rede não linear para o problema de um elétron pode ser explicado pelo papel desempenhado pelo grau de acoplamento elétron-fônon. Considerando, por exemplo, um valor pequeno de  $\alpha = 0.1$ , verificou-se que, para  $F = 0, 2; 0, 4; 0, 6$ , o elétron permaneceu capturado em torno da posição inicial, com oscilações aproximadas às de Bloch. A figura 2.5 (a) evidenciou tal caráter para os campos estudados, sendo confirmado pela transformada de Fourier  $\langle n(\omega) \rangle$  do centroide (2.5 (b)). A frequência dominante corresponde aproximadamente à magnitude do campo elétrico, estando em acordo com o modelo semi-clássico de dinâmica eletrônica na presença de um campo elétrico uniforme. Desta forma, para uma interação fraca elétron-fônon, mesmo com alterações devido *hopping* ao longo da cadeia gerando uma mudança leve no grau de periodicidade dos potenciais, o campo elétrico captura o

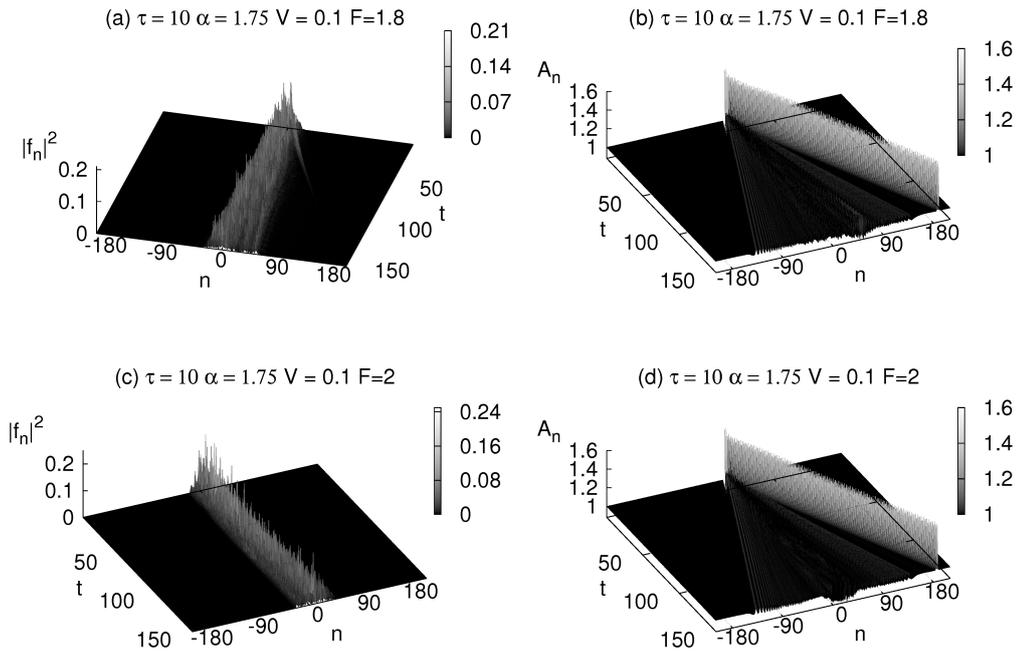


FIGURA 2.4 – (a,c) Valor absoluto ao quadrado da componente da função de onda no sítio  $n$ ,  $|f_n|^2$  versus  $t$  e  $n$  para  $\alpha = 1.75, \tau = 10, V = 0.1$  e  $F = 1.8, 2$ . (b,d) Deformação da rede  $A_n$  para situação equivalente a (a,c).

Fonte: Elaborado pelo autor.

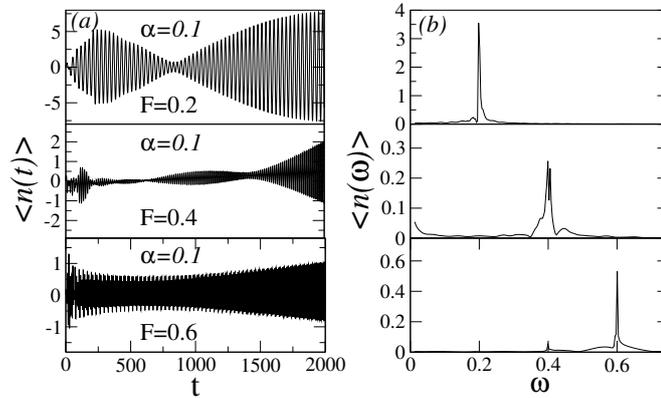


FIGURA 2.5 – Lado esquerdo: centróide do elétron para  $\alpha = 0.1$  e  $F = 0.2, 0.4, 0.6$ . Lado direito: Transformada de Fourier  $\langle n(\omega) \rangle$  do centróide relativa a cada situação apresentada à esquerda. Aparentemente, nestes casos, a dinâmica do elétron resume-se à oscilações de Bloch com frequências de magnitude similar a do campo eletrostático ( $\omega \approx F$ ).

Fonte: Elaborado pelo autor.

elétron promovendo uma oscilação de Bloch quase coerente, com  $\omega \approx F$ .

A partir de tais constatações, surgiu uma questão: Qual é o grau de acoplamento em que ocorre uma transição entre o aprisionamento do elétron com oscilação quase Bloch e

a captura deste pela onda solitária sendo conduzido ao longo da rede?

Para dar início à resposta, foram elaborados os diagramas da figura 2.6. Os gráficos apresentaram os valores de  $\langle n(t) \rangle$  em função do tempo para os valores  $F = 0, 2; 0, 4; 0, 6; 1, 2$  e para diferentes fatores de acoplamento elétron-fônon  $\alpha$ . Assim, verificou-se que havia, para cada valor de  $F$ , valores de  $\alpha$  que caracterizavam diferentes regimes da dinâmica eletrônica. Uma elevada magnitude de  $\alpha$  estava associada ao movimento do elétron ao longo da cadeia e uma interação fraca relacionou-se com a localização do pacote de onda.

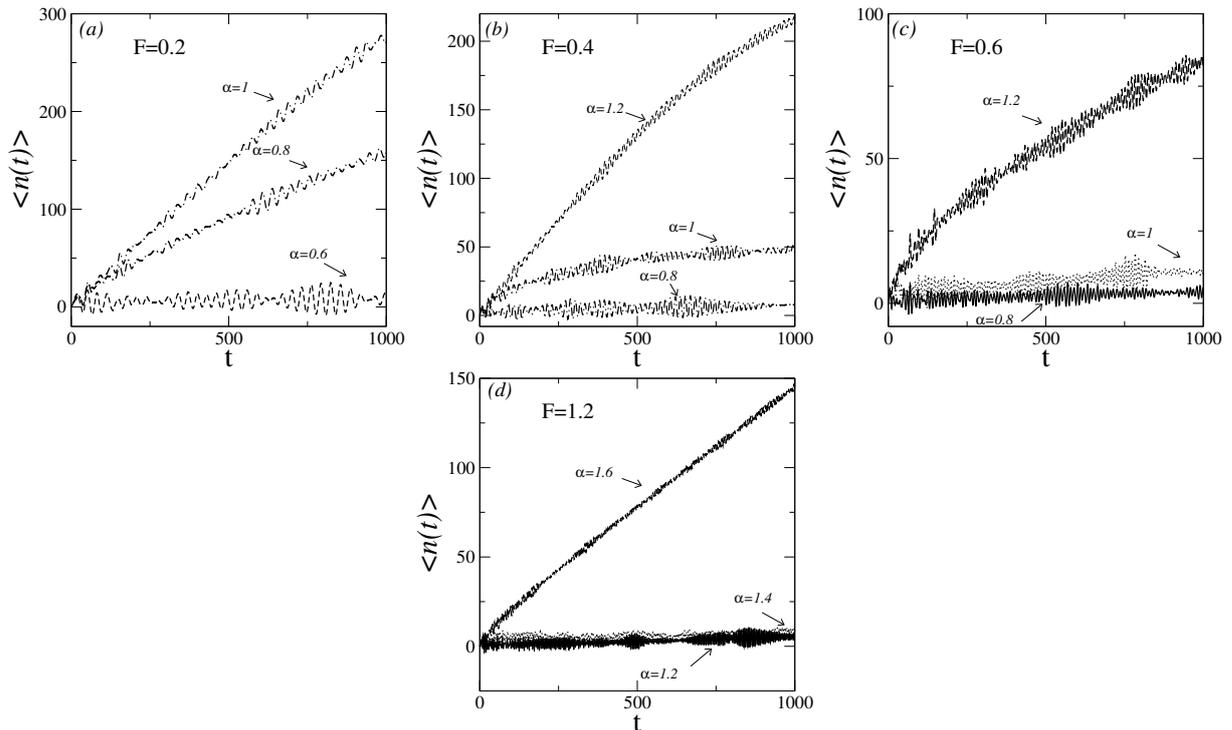


FIGURA 2.6 – Posição esperada do elétron  $\langle n(t) \rangle$  versus tempo para  $F = 0.2, 0.4, 0.6, 1.2$  e para valores distintos do grau de acoplamento elétron-fônon  $\alpha$ . Verifica-se que, quanto maior  $\alpha$ , há maior facilidade de o elétron descrever dinâmica diversa à da oscilação de Bloch, o que leva à conclusão de que deve existir, para cada  $F$ , um valor específico de  $\alpha$  que separa o estado de oscilação de Bloch do elétron do estado em que se observa o movimento do par elétron-soliton.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Dados os indícios preliminares da influência de  $\alpha$  sobre o pacote de onda, o próximo passo para um exame mais aprofundado acerca da pergunta anterior foi o de se elaborar, por meios numéricos, um diagrama de fase envolvendo  $\alpha$  e  $F$ . Este foi esboçado na figura 2.7. O procedimento utilizado para sua construção envolveu o acompanhamento de  $\langle n(t) \rangle$  e de  $\xi(t)$  para cada par  $(F, \alpha)$ . Quando  $\langle n(t) \rangle$  possuía frequência dominante  $\omega \approx F$  e  $\xi(t)$  permanecia pequeno, isto caracterizava a fase de aprisionamento do pacote de onda em torno da posição inicial em um tipo de oscilação quase Bloch. Em contrapar-

tida, o estado de formação de um par elétron-soliton seria registrado caso não ocorressem oscilações coerentes e o valor de  $\langle n(t) \rangle$  se mostrasse crescente acompanhando a deformação da rede, com  $\xi(t)$  pequeno. Na situação  $F = 0$ , o par elétron-soliton esteve presente para os valores de  $\alpha \neq 0$  testados.

Logo, dado  $F$ , foram testados os valores de  $\alpha$  que correspondessem à fronteira entre as fases explicitadas. O ponto crítico foi dado por  $\alpha_c = \langle \alpha_c \rangle \pm \Delta\alpha_c$ , em que a região de tolerância foi  $\Delta\alpha_c \approx 0.05$ . Para  $\alpha > \alpha_c$ , a fase é caracterizada pela formação do par elétron-soliton e para  $\alpha < \alpha_c$ , ocorrem as oscilações de Bloch. Dentro do intervalo  $[\langle \alpha_c \rangle - \Delta\alpha_c, \langle \alpha_c \rangle + \Delta\alpha_c]$  há uma região cuja fase é indefinida.

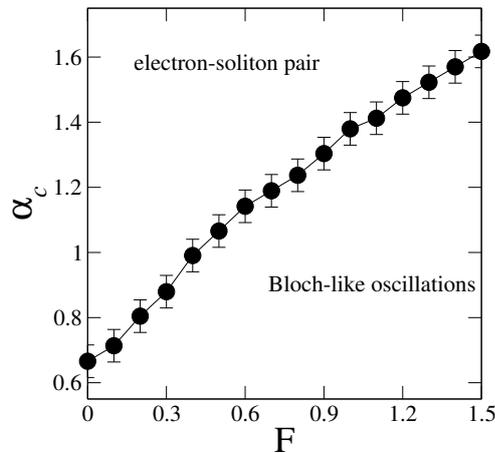


FIGURA 2.7 – Diagrama de fase  $\alpha_c \times F$ . A linha com marcadores indica os pares ordenados  $(\alpha_c, F)$  em que ocorre o processo de transição entre os estados.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na ausência de campo elétrico, existe um valor mínimo de  $\alpha_c \approx 0.65 \pm 0.05$  que separa os dois estados. A dinâmica do elétron neste sistema, para  $\alpha < \alpha_c$ , foi descrita da seguinte forma: a maior parte do pacote de onda ficou livre e uma fração muito pequena desta foi capturada pelo soliton. Assim, tal modo foi incapaz de permitir que a maior densidade de probabilidade eletrônica caminhasse com velocidade semelhante a ele.

Ainda na figura 2.7, à medida que  $F$  cresce, o valor crítico de  $\alpha_c$  também cresce. Para  $F \neq 0$ , passa a existir a possibilidade de localização do pacote de onda na origem da rede, pois há um potencial linear que aprisiona o elétron em torno da posição inicial propiciando as oscilações de Bloch. Desta forma, a intensidade elétron-fônon deve aumentar para compensar o aprisionamento da partícula.

O diagrama da figura 2.7 limitou-se a valores de  $F \leq 1,5$ , pois tanto na região de mudança de regime de dinâmica do elétron para  $\alpha = 1,75$  ( $1,5 < F < 2$ ) quanto no estado de aprisionamento do pacote de onda na posição inicial ( $F \geq 2$ ), somente foi obtida precisão adequada nos cálculos para valores de acoplamento até  $\alpha \approx 2$ . É possível que, para algum valor de  $\alpha$  maior que 2, haja formação de um par elétron-soliton para

$F > 1.5$ . Todavia, a hipótese não pôde ser confirmada devido à falta de precisão nos cálculos, mesmo utilizando ferramentas como o método de Runge-Kutta de oitava ordem. Além disso, alguns autores evitaram trabalhar com a situação  $\alpha > 2$  ([HENNIG \*et al.\*, 2008](#); [MAKAROV \*et al.\*, 2006](#)).

# 3 REDE UNIDIMENSIONAL NA PRESENÇA DE DESORDEM E DE ONDAS ACÚSTICAS

## 3.1 Introdução

Neste capítulo, foi estudado o transporte eletrônico em um modelo unidimensional de rede de tamanho  $N$  com desordem em seus elementos centrais e sob a influência de uma onda acústica de superfície. Considerou-se, também, a hipótese de que os elétrons livres não interagem entre si, somente sofrendo influência dos elementos nucleares da rede. Concorrem a este capítulo, as mesmas observações apresentadas anteriormente, reiterando-as: salvo disposição em contrário, explícita no texto, foram tomados como sinônimos os termos elemento de rede, átomo e íon.

## 3.2 O Modelo

A representação matemática do sistema estudado foi elaborada com base em dois formalismos: para simular as vibrações da rede foram utilizados os preceitos da mecânica clássica e, para a dinâmica do elétron, resgatou-se a álgebra de estados (*ket*) da teoria quântica. As expressões dos hamiltonianos do elétron ( $H_e$ ) e da rede ( $H_{lattice}$ ) são, respectivamente (3.1) e (3.2)

$$H_e = \sum_{m=1}^N \epsilon_m f_m^\dagger f_m + \sum_{m=1}^N \tau_{m+1,m} (f_{m+1}^\dagger f_m + f_m^\dagger f_{m+1}) \quad (3.1)$$

e

$$H_{lattice} = \sum_{m=1}^N \frac{p_m^2}{2M_m} + \frac{1}{4} \sum_{m=1}^N \left[ (x_{m+1} - x_m)^2 + (x_m - x_{m-1})^2 \right], \quad (3.2)$$

onde  $M_m$  e  $\epsilon_m$  representam, respectivamente, a massa do elemento  $m$  da rede e a energia potencial percebida pelo elétron ao interagir com aquele.  $\tau_{m+1,m}$  é o termo cinético associado à mobilidade da função de onda entre núcleos próximos,  $f_m^\dagger$  é o operador criação,  $f_m$  é o operador de aniquilação e  $x_m$  e  $p_m = M_m \dot{x}_m$  correspondem à posição atômica em relação ao *locus* de equilíbrio e ao momentum do elemento cujo sítio é designado pelo índice  $m$ , nesta ordem.

No hamiltoniano  $H_{lattice}$ , o primeiro termo da esquerda para a direita descreve a energia cinética de cada átomo da rede e o segundo caracteriza, matematicamente, a energia potencial interatômica, função não quadrática dos deslocamentos relativos entre o elemento central e os vizinhos mais próximos da rede.

Visando a simular desordem ao longo da rede, foram construídas, para cada  $m = 1, \dots, N$ , as variáveis aleatórias  $\epsilon_m$  e  $\eta_m$ , com distribuição de probabilidade uniforme no intervalo  $[-W/2, W/2]$ . Essas ainda apresentam as seguintes propriedades: para todo  $m = 1, \dots, N$ ,  $\langle \epsilon_m \rangle = \langle \eta_m \rangle = \langle \epsilon_m \eta_m \rangle = 0$  e, para  $m \neq n$ ,  $\langle \epsilon_m \epsilon_n \rangle = \langle \epsilon_m \eta_n \rangle = \langle \eta_m \eta_n \rangle = 0$ . A massa do elemento do sítio  $m$  é uma função da variável  $\eta_m$ , dada por  $M_m = e^{(\eta_m)}$ . As observações de  $\epsilon_m$ ,  $\eta_m$  e  $M_m$  foram colhidas a partir dos resultados de um gerador de números aleatórios, que obedeceram às hipóteses aqui postas. O algoritmo utilizado foi o de Park e Miller, com embaralhamento de Bays-Durham (PRESS *et al.*, 1996).

O liame entre os movimentos da rede e do elétron é dado pelo termo de *hopping*,  $\tau_{m+1,m} = -e^{[-\alpha(x_{m+1}-x_m)]}$ , em que  $\alpha$  representa, em unidade de espaço de rede, o termo elétron-fônon. Tal formulação recupera, para valores pequenos de deslocamento entre átomos vizinhos, a aproximação de Su, Schrieffer e Heeger (SSH)  $\tau_{m+1,m} \approx -[1 - \alpha(x_{m+1} - x_m)]$  (SU *et al.*, 1979).

O desenvolvimento matemático de expressões que regem a dinâmica dos entes foi dividido em duas partes, a saber: a primeira está associada ao movimento do elétron e a segunda, ao progresso temporal das deformações da rede.

Para o cálculo da dinâmica do elétron, procedeu-se de acordo com o apresentado no Capítulo 2, a partir da representação da função de onda no espaço de sítios da rede, com  $\Phi(t) = \sum_m c_m(t)|m\rangle$ , onde  $c_m(t)$  são as amplitudes de Wannier. A evolução temporal dos orbitais resulta da equação de Schrödinger dependente do tempo (3.3):

$$i\hbar \frac{d|\Phi(t)\rangle}{dt} = H_e |\Phi(t)\rangle \quad (3.3)$$

onde  $\hbar = 1$ . Substituindo  $H_e$  em (3.3) por (3.1), obtém-se:

$$i \frac{dc_m(t)}{dt} = \epsilon_m c_m(t) - e^{[-\alpha(x_{m+1}-x_m)]} c_{m+1}(t) - e^{[-\alpha(x_m-x_{m-1})]} c_{m-1}(t). \quad (3.4)$$

Por seu turno, o modelo clássico da rede impeliu, indubitavelmente, o uso da equação de Hamilton  $\frac{dp_n(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_n(t)}$ . Devido à existência de um termo de acoplamento entre os átomos e o elétron móvel, aquela deve ser empregada no sistema todo, com  $H = H_e + H_{lattice}$ . Entretanto, conforme mostrado no capítulo anterior,  $H_e$  é um operador, pois foi delimitado sob a égide da teoria quântica devendo, portanto, ser compatibilizado ao uso do formalismo anterior. Assim, a expressão correta do hamiltoniano para o caso em tela é  $H = \langle \Phi(t) | H_e | \Phi(t) \rangle + H_{lattice}$ , gerando a equação da progressão temporal das deformações da rede

$$\begin{aligned} M_m \frac{d^2 x_m}{dt^2} &= x_{m+1} - 2x_m + x_{m-1} \\ &- \alpha \{ e^{[-\alpha(x_{m+1}-x_m)]} (c_{m+1}^*(t)c_m(t) + c_{m+1}(t)c_m^*(t)) \\ &- e^{[-\alpha(x_m-x_{m-1})]} (c_m^*(t)c_{m-1}(t) + c_m(t)c_{m-1}^*(t)) \}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

Findada a exteriorização matemática do sistema, recorreu-se, em seguida, à delimitação da influência denominada onda acústica de superfície (SAW). Esta foi inserida por meio da vibração harmônica de um elemento da rede, localizado no sítio  $m = 0$ , sendo sua propagação efetivada por meio das variações das energias potenciais de interação entre os íons. Neste trabalho, a onda foi descrita por

$$x_0 = A_0 \cos(\omega t), \quad (3.6)$$

onde  $\omega$  representa a frequência da onda acústica.

As condições iniciais do problema recaíram sobre o elétron (localizado no sítio  $m = 1$ , perfazendo o estado  $|\Phi(t = 0)\rangle = \sum_m \delta_{m,1}(t = 0)|m\rangle$ ), sobre os deslocamentos e sobre as velocidades dos átomos ( $x_m(t = 0) = \dot{x}_m(t = 0) = 0$  para  $m \in [1, N]$ ).

O procedimento numérico aplicado a este caso foi o de combinar a expansão de Taylor de ordem elevada para o elétron com o método das diferenças finitas de segunda ordem, destinado à rede. No Capítulo 2, foram pormenorizados os detalhes do emprego da primeira técnica em um sistema análogo ao aqui exposto, restando sua apresentação geral. Destarte, a equação de Schrödinger, sob a forma de vetores de estado é descrita por  $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\Phi(t = 0)\rangle$ , onde  $U(\Delta t)$  é o operador de evolução temporal e pode ser representado pela expansão truncada em  $n_o$  (MOURA, 2011):

$$U(\Delta t) = \exp(-iH_e\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} \frac{(-iH_e\Delta t)^l}{l!} \quad (3.7)$$

onde  $H_e$  corresponde ao hamiltoniano de um elétron. Fazendo (3.7) recursivamente,

obtém-se a função de onda em  $t$ .

Por seu turno, o último processo consiste em uma discretização da eq. (3.5) reescrevendo a derivada temporal:

$$\frac{d^2 x_m}{dt^2} \approx \frac{x_m(t + \Delta t) - 2x_m(t) + x_m(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} \quad (3.8)$$

Logo, a eq. (3.5) pode ser resolvida numericamente sob a forma:

$$\begin{aligned} x_m(t + \Delta t) \approx & 2x_m(t) - x_m(t - \Delta t) + \frac{(\Delta t)^2}{M_m} \{x_{m+1}(t) - 2x_m(t) + x_{m-1}(t) \\ & - \alpha [e^{-\alpha(x_{m+1}(t) - x_m(t))}] (c_{m+1}^*(t)c_m(t) + c_{m+1}(t)c_m^*(t)) \\ & - e^{-\alpha(x_m(t) - x_{m-1}(t))} (c_m^*(t)c_{m-1}(t) + c_m(t)c_{m-1}^*(t))\}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

Todos os cálculos foram realizados fixando-se o passo em  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$  e truncando-se a expansão (3.7) em  $n_o = 10$ . A partir desses valores, foi possível manter a precisão numérica, calculada pelo desvio absoluto da soma dos quadrados dos módulos das amplitudes de Wannier em relação a 1, em nível inferior a  $10^{-10}$  ( $|1 - \sum_m |c_m(t)|^2| < 10^{-10}$ ) ao longo de todo o intervalo estudado ( $t_{max} \approx 3 \times 10^4$ ) e para os valores dos parâmetros avaliados.

Após resolver, por meio computacional, as equações, foram calculadas duas grandezas normalmente utilizadas na avaliação do transporte eletrônico em modelos com desordem: a posição média do elétron (centroide) e seu desvio padrão, assim definidos, respectivamente:

$$\langle m(t) \rangle = \sum_m (m) |c_m(t)|^2 \quad (3.10)$$

e

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_m (m - \langle m(t) \rangle)^2 |c_m(t)|^2}. \quad (3.11)$$

As expressões assemelham-se às encontradas em [Moura \(2013\)](#), [Sales et al. \(2015\)](#), [Santos et al. \(2015\)](#). O centroide, para o instante  $t$ , é a posição média de um elétron em relação ao centro de uma cadeia autoexpandida e o desvio quadrático médio fornece uma estimativa do tamanho do pacote em  $t$ .

### 3.3 Resultados e Discussão

A partir das condições iniciais e dos parâmetros estabelecidos na seção anterior, foi utilizado  $W = 2$  para gerar os resultados evidenciados nas figs. 3.1, 3.2, 3.3. Devido à presença de desordem na distribuição das massas, o intervalo permitido de frequências

de oscilação do gerador de ondas acústicas (elemento localizado no sítio  $m = 0$ ) foi forçosamente determinado em níveis baixos ( $\omega \ll 1$ ), caso contrário, haveria prejuízo sobre o estudo propagação dos modos vibracionais em redes harmônicas com desordem, conforme experimentado por [Sales \*et al.\* \(2012\)](#).

Para minimizar os efeitos de borda, foi construída uma cadeia autoexpandida na qual a regra de inserção de elementos foi estabelecida do seguinte modo: se tanto a vibração atômica quanto a probabilidade de se encontrar o elétron no lado direito da rede fossem superiores a  $10^{-20}$ , então seriam criados 10 novos sítios à direita desta.

Reforçando o exposto na seção anterior, a convergência numérica foi assegurada para todos os resultados apresentados neste capítulo por meio do teste da norma do pacote de onda, havendo um desvio menor que  $10^{-10}$  da unidade ( $|1 - \sum_m |c_m(t)|^2| < 10^{-10}$ ).

Por se tratar de um problema que envolve desordem, um fenômeno aleatório, ressalta-se que, para cada quadra de parâmetros estudados ( $\alpha, \omega, A_0, W$ ), foram obtidas 30 medições de cada uma das variáveis  $\langle m(t) \rangle, \sigma(t), |c_m(t)|^2$  para cada instante  $t$  e, em seguida, aferiu-se a média amostral de cada uma delas, compondo, assim, os resultados descritos pelas Euuras [3.1](#), [3.2](#), [3.3](#) e [3.4](#). Não houve necessidade de se construírem intervalos de confiança, dado que o erro padrão da amostra foi muito pequeno em comparação com as médias obtidas. De acordo com a [fig. 3.1](#), foi possível verificar que, na ausência de acoplamento elétron-fônon ( $\alpha = 0$ ), independentemente das frequências de oscilação do gerador (bombeamento) analisadas,  $\omega = 0.1, 0.2, 0.3$ , o elétron permaneceu localizado próximo a sua posição inicial, estando em consonância com o modelo padrão unidimensional de Anderson com desordem diagonal, cuja magnitude é da ordem do comprimento de banda. Desta forma, a distribuição eletrônica foi caracterizada por autoestados localizados exponencialmente, gerando a convergência de  $\sigma$  e de  $\langle m(t) \rangle$  em  $t \gg 1$ .

Nos casos em que  $\alpha > 0$ , tanto  $\sigma$  quanto  $\langle m(t) \rangle$  cresceram ao longo do tempo. Ao avaliar o regime de difusão da dinâmica eletrônica, foi evidenciado, nas situações em que  $\alpha > 0$ , comportamento subdifusivo:  $\sigma \propto t^\zeta$ , com  $\zeta = 0.4 - 0.45$ .

Conforme observação realizada sobre os diagramas da [figura 3.1](#), foi possível encontrar indícios de uma ruptura da localização de Anderson resultando um transporte de carga mediado pela associação entre a interação eletron-fônon e o bombeamento da onda acústica na extremidade esquerda da rede. Aparentemente, a oscilação externa tende a empurrar o pacote de onda ao longo da cadeia. Em busca de um reforço da tese proferida no parágrafo anterior, foi necessário compreender a evolução da dinâmica eletrônica ao longo da rede. A [figura 3.2](#) mostra o comportamento das amplitudes de probabilidade do ente quântico ( $|c_m(t)|^2$ ) *versus*  $m$  e  $t$  para valores específicos dos parâmetros  $\omega = 0.1, 0.2$  e  $\alpha = 0, 0.5$ . Em (a), verificou-se que o pacote de onda permaneceu localizado à esquerda da rede e, na situação em que o acoplamento elétron-fônon estava presente (b), aquele espargiu ao

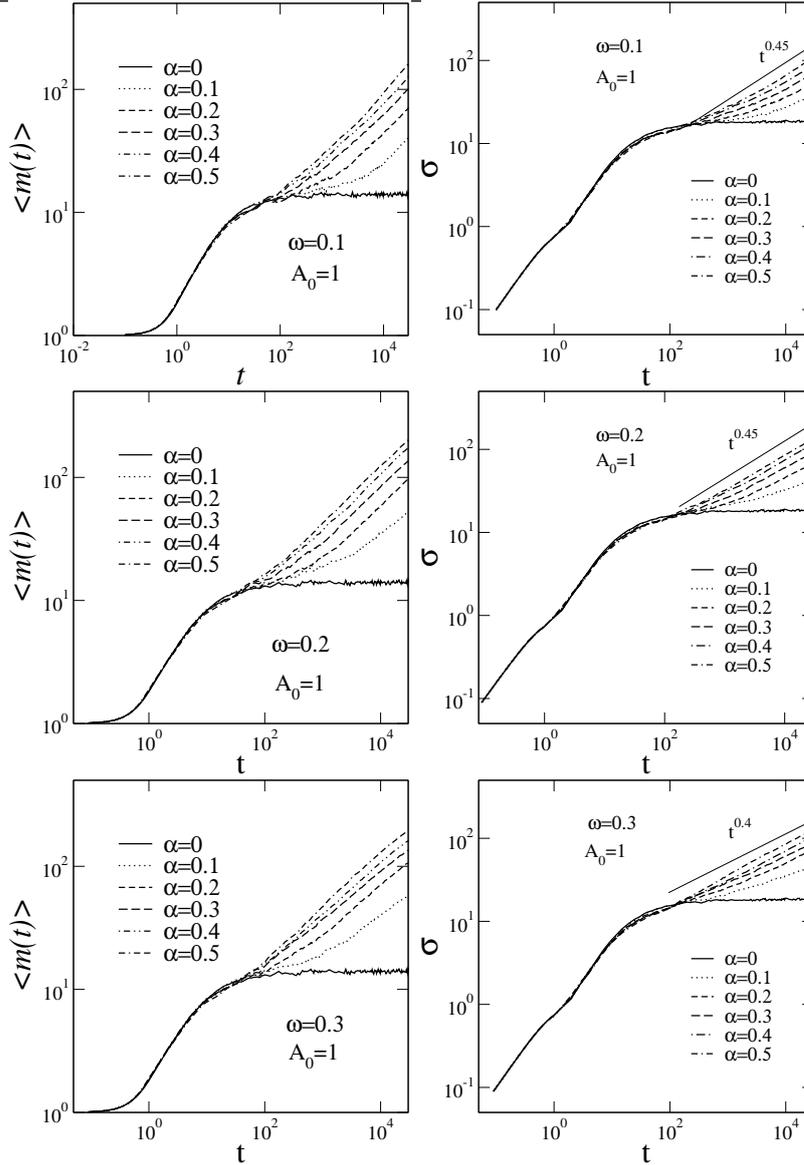


FIGURA 3.1 – Posição média e desvio quadrático médio calculados para  $\omega = 0.1, 0.2, 0.3$  e  $\alpha = 0$  até  $0.5$ . A amplitude do oscilador harmônico foi  $A_0 = 1$ . Para  $\alpha > 0$  foi possível observar que tanto  $m(t)$  quanto  $\sigma(t)$  aumentam ao longo do tempo. Os cálculos sugerem que a quebra da localização de Anderson deve-se ao acoplamento do elétron com o modo acústico gerado na extremidade esquerda da cadeia de átomos.

Fonte: Elaborado pelo autor.

longo da cadeia à medida que o tempo evoluía. Estes resultados corroboram o que foi visualizado na figura 3.1, robustecendo a ideia de que o transporte eletrônico é possível quando há associação entre o elétron e os modos acústicos da rede. As influências de variações dos demais parâmetros sobre o sistema também foram estudadas. Na figura 3.3, foi analisado o efeito da amplitude da oscilação induzida pelo elemento à esquerda da rede  $A_0$  sobre o transporte eletrônico. Foram construídos os gráficos do centroide  $\langle m(t) \rangle$  e da largura do pacote de onda  $\sigma$  versus tempo para  $\omega = 0.1, \alpha = 0.1, 0.2$  e para

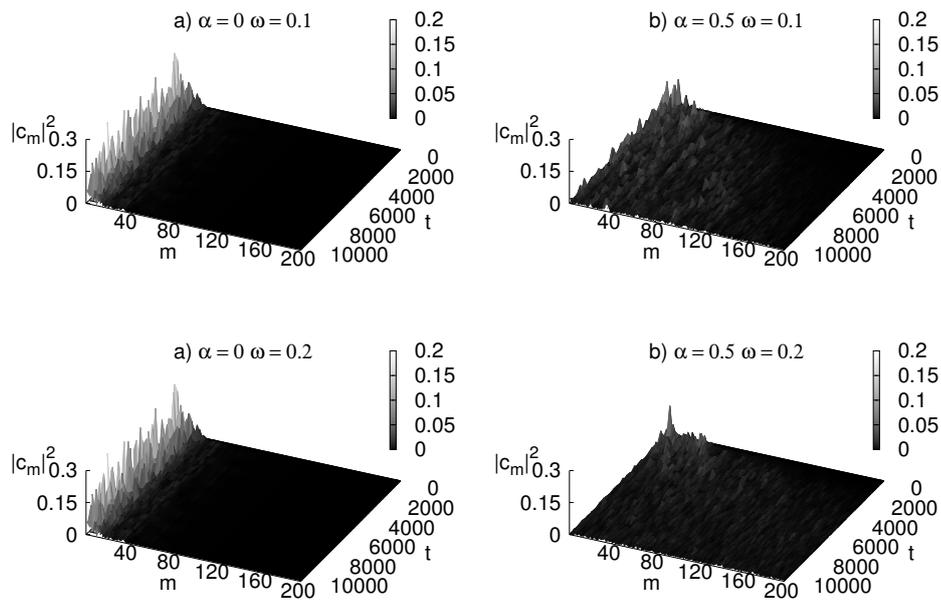


FIGURA 3.2 –  $|c_m(t)|^2$  versus  $t$  e  $m$  para  $\omega = 0.1, 0.2$  e  $\alpha = 0, 0.5$ .  
 Fonte: Elaborado pelo autor.

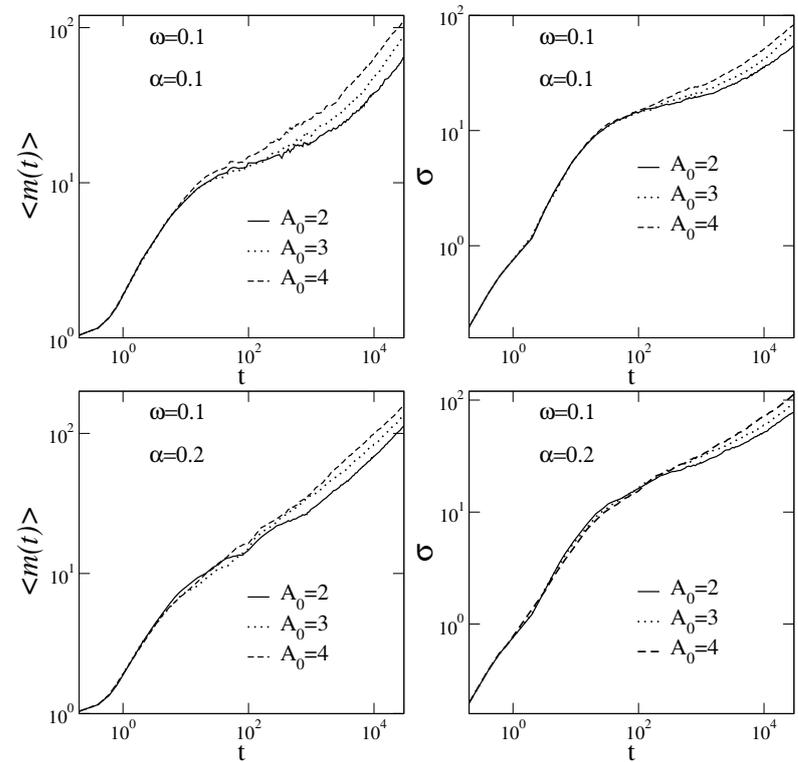


FIGURA 3.3 – Centroide  $\langle m(t) \rangle$  e a difusão do pacote de onda  $\sigma$  versus tempo para  $\omega = 0.1, \alpha = 0.1, 0.2$  e  $A_0 = 2, 3, 4$ .  
 Fonte: Elaborado pelo autor.

$A_0 = 2, 3, 4$ . As medidas aparentaram um pequeno aumento para valores crescentes de  $A_0$ . Qualitativamente, as observações não diferiram do exposto nas figuras 3.1, 3.2 e 3.3, isto é, dentro da aproximação harmônica, os modos acústicos promovem o transporte eletrônico, desde que elétron e as vibrações da rede estejam acopladas. Deve-se acrescentar que o nível de desordem considerado,  $W = 2$ , é da mesma ordem da largura de banda eletrônica de uma rede cristalina.

Em níveis mais altos de desordem, o transporte eletrônico foi mantido. A figura 3.4 mostra as medidas  $\langle m(t) \rangle$  e  $\sigma$  versus tempo para diferentes valores de desordem  $W = 3, 4, 5$  ( $W = 5$  é considerado desordem forte em cadeias unidimensionais), mantidos fixos  $\omega = 0.1$  e  $\alpha = 0.2$ . Todavia, tanto a difusão quanto a posição média do elétron diminuiriam com o incremento de  $W$ . A dinâmica manteve seu caráter subdifusivo.

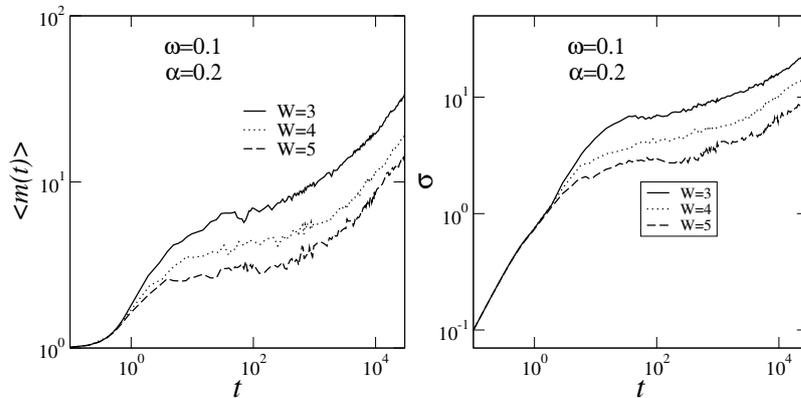


FIGURA 3.4 – Centroide  $\langle m(t) \rangle$  e a difusão do pacote de onda  $\sigma$  versus tempo para  $\omega = 0.1$ ,  $\alpha = 0.2$ ,  $A_0 = 1$  e  $W = 3, 4, 5$ .

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 4 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi o de estudar o transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade com interação elétron-fônon e sob a influência de campo elétrico.

Na introdução, foi apresentado um histórico dos principais modelos de dinâmica de elétrons em sólidos rememorando as contribuições de Drude, Sommerfeld, Bloch e Anderson. Em seguida, fez-se uma revisão da literatura sobre os tipos de interações que foram analisadas em detalhe ao longo da obra.

As linhas contidas no capítulo 2 foram dedicadas ao exame da contribuição de um campo elétrico estático sobre o transporte eletrônico em uma rede unidimensional de Morse com acoplamento elétron-fônon. O elétron foi tratado como um ente da teoria quântica, enquanto as vibrações da cadeia de átomos foram descritas nos cânones da mecânica clássica.

A interação do elétron com a rede foi representada pelo termo de *hopping* entre os sítios vizinhos como função da distância efetiva entre estes.

Resolvendo numericamente as equações da dinâmica do modelo na condição inicial de elétron e de deformação localizados em um único sítio da rede, verificou-se resumidamente que, para campo elétrico de intensidade baixa, ocorreu a formação de um par elétron-soliton destruindo, desta forma, as oscilações de Bloch, assim evidenciando a dominância daquele par sobre tal influência externa. Em elevadas magnitudes do campo, o ente quântico permaneceu preso em torno do sítio em que se encontrava inicialmente e o modo solitônico propagou-se pela rede com perdas diminutas de energia.

Sobre a competição entre campo elétrico e acoplamento elétron-fônon, foi ainda construído um diagrama de fase em que se buscou encontrar a região crítica de transição da fase oscilatória para a do par elétron-soliton. Tal conjunto foi obtido a partir do comportamento do sistema dados os valores do campo elétrico e da constante de acoplamento.

O capítulo 3 contém o estudo da dinâmica de um elétron inicialmente localizado em uma rede harmônica com desordem não correlacionada e com acoplamento elétron-fônon, sob a influência de uma onda acústica que atua sobre as deformações da cadeia. Os formalismos da rede e do elétron foram apresentados de modo análogo ao retratado no

capítulo anterior, bem como o termo de *hopping*, que também possui dependência em relação à distância efetiva entre átomos próximos.

Por meio de métodos numéricos empregados nas expressões relativas à progressão temporal do sistema, foi verificado que o acoplamento elétron rede e o bombeamento da onda acústica, em ação conjunta, anularam o fenômeno da localização de Anderson. Mesmo para um nível elevado de desordem, ainda se observou a mobilidade elétrica ao longo da rede.

Após a realização dos experimentos computacionais supracitados, algumas questões ficaram em aberto, sugerindo possíveis estudos futuros. Dentre elas, pode-se citar o problema de transporte eletrônico em sistemas similares aos aqui estudados na presença de elétrons interagentes ou em redes com topologias diferentes.

# REFERÊNCIAS

ABRAHAMAS, E.; ANDERSON, P. W.; LICCIARDELLO, D. C.; RAMAKRISHNAN, T. V. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. **Physical Review Letters**, APS, v. 42, n. 10, p. 673, 1979.

ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical review**, APS, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do estado sólido**. [S.l.]: Cengage Learning, 2011.

BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. **Zeitschrift für physik**, Springer, v. 52, n. 7-8, p. 555–600, 1929.

CHETVERIKOV, A.; EBELING, W.; VELARDE, M. Controlling fast electron transfer at the nano-scale by solitonic excitations along crystallographic axes. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 85, n. 8, p. 1–8, 2012.

CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. Properties of nano-scale soliton-like excitations in two-dimensional lattice layers. **Physica D**, v. 240, n. 24, p. 1954–1959, 2011. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167278911002466>>.

DATTA, P.; KUNDU, K. Time evolution of models described by a one-dimensional discrete nonlinear schrödinger equation. **Physical Review B**, APS, v. 53, n. 22, p. 14929, 1996.

DIAS, W. S. **Propriedades de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade na presença de interação**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2011.

DRUDE, P. Zur elektronentheorie der metalle. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 306, n. 3, p. 566–613, 1900.

EDWARDS, J. T.; THOULESS, D. J. Numerical studies of localization in disordered systems. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 5, n. 8, p. 807, 1972.

ELSNER, U.; MEHRMANN, V.; MILDE, F.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. The anderson model of localization: a challenge for modern eigenvalue methods. **SIAM Journal on Scientific Computing**, SIAM, v. 20, n. 6, p. 2089–2102, 1999.

HAIRER, E.; NORSETT, S. P.; WANNER, G. Solving ordinary differential equation i: nonstiff problems. **Springer Series in Computational Mathematics**, v. 8, 1987.

HARTMANN, T.; KECK, F.; KORSCH, H.; MOSSMANN, S. Dynamics of bloch oscillations. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 6, n. 1, p. 2, 2004.

HENNIG, D.; VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. Compounds of paired electrons and lattice solitons moving with supersonic velocity. **Physical Review E**, v. 78, 2008. Disponível em: <<http://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.78.066606>>.

HENNING, D.; CHETVERIKOV, A.; VELARDE, M. G.; EBELING, W. Electron capture and transport mediated by lattice solitons. **Physical Review E**, v. 76, n. 4, 2007. Disponível em: <<http://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.76.046602>>.

HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part i. the molecular-crystal model. **Annals of physics**, Elsevier, v. 8, n. 3, p. 325–342, 1959.

HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part ii. the small polaron. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 8, n. 3, p. 343–389, 1959.

JR, L. A. R.; CUNHA, W. F. da; FONSECA, A. L. A.; SILVA, G. M.; STAFSTRÖM, S. Transport of polarons in graphene nanoribbons. **Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 6, n. 3, p. 510–514, 2015. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jz502460g>>.

KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 56, n. 12, p. 1469, 1993.

LICCIARDELLO, D.; THOULESS, D. Conductivity and mobility edges for two-dimensional disordered systems. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 8, n. 24, p. 4157, 1975.

LIFSHITZ, I. M.; GREDESKUL, S. A.; PASTUR, L. A. **Introduction to the theory of disordered systems**. [S.l.]: Wiley-Interscience, 1988.

LIMA, M. P.; SILVA, G. M. Dynamical evolution of polaron to bipolaron in conjugated polymers. **Physical Review B**, v. 74, 2006. Disponível em: <<http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.74.224304>>.

MAKAROV, V. A.; VELARDE, M. G.; CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W. Anharmonicity and its significance to non-ohmic electric conduction. **Physical Review E**, v. 73, 2006. Disponível em: <<http://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.73.066626>>.

MCNEIL, R. P. G.; KATAOKA, M.; FORD, C. J. B.; BARNES, C. H. W.; ANDERSON, D.; JONES, G. A. C.; FARRER, I.; RITCHIE, D. A. On-demand single-electron transfer between distant quantum dots. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 477, n. 7365, p. 439–442, 2011.

MORSE, P. M. The quantum mechanics of electrons in crystals. **Physical Review**, APS, v. 35, n. 11, p. 1310, 1930.

MOURA, F. A. B. F. de. **Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2003.

MOURA, F. A. B. F. de. Dynamics of one-electron in a one-dimensional systems with an aperiodic hopping distribution. **International Journal of Modern Physics**, v. 22, n. 63, 2011. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183111016063>>.

MOURA, F. A. B. F. de. Numerical evidence of electron–soliton dynamics in fermi–pasta–ulam disordered chains. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, Elsevier, v. 253, p. 66–72, 2013.

NEAMEN, D. **Semiconductor physics and devices**. [S.l.]: McGraw-Hill, Inc., 2002.

PEIERLS, R. Zur theorie der elektrischen und thermischen leitfähigkeit von metallen. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 396, n. 2, p. 121–148, 1930.

PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical recipes in C**. [S.l.]: Citeseer, 1996.

SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**. Los Angeles: Addison-Wesley, 1994.

SALES, M. O.; ALBUQUERQUE, S. S.; MOURA, F. A. B. F. de. Energy transport in a one-dimensional harmonic ternary chain with ornstein–uhlenbeck disorder. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 24, n. 49, p. 495401, 2012.

SALES, M. O.; LYRA, M. L.; MOURA, F. A. B. F. de; FULCO, U. L.; ALBUQUERQUE, E. L. Sub-diffusive electronic transport in a dna single-strand chain with electron–phonon coupling. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 27, n. 3, p. 035104, 2015.

SALES, M. O.; MOURA, F. A. B. F. de. Electron-soliton dynamics in chains with cubic nonlinearity. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 26, n. 41, 2014. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/26/41/415401/meta>>.

SANTOS, J. L. L. dos; NGUYEN, B. P.; MOURA, F. A. B. F. de. Electronic transport in disordered chains with saturable nonlinearity. **Physica. A**, v. 435, n. 1, 2015. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437115003970>>.

SHILTON, J. M.; MACE, D.; TALYANSKII, V. I.; GALPERIN, Y.; SIMMONS, M. Y.; PEPPER, M.; RITCHIE, D. A. On the acoustoelectric current in a one-dimensional channel. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 8, n. 24, p. L337, 1996.

SHILTON, J. M.; TALYANSKII, V. I.; PEPPER, M.; RITCHIE, D. A.; FROST, J. E. F.; FORD, C. J. B.; SMITH, C. G.; JONES, G. A. C. High-frequency single-electron transport in a quasi-one-dimensional gaas channel induced by surface acoustic waves. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 8, n. 38, p. L531, 1996.

SILVA, G. M.; BRITO, A. N. de; CORREIA, N. Dynamics of conformational defects in poly(3-hexyl)thiophene. **Physical Review B**, v. 53, 1996. Disponível em: <<http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.53.7222>>.

SOMMERFELD, A. Zur elektronentheorie der metalle auf grund der fermischen statistik. **Zeitschrift für Physik**, Springer, v. 47, n. 1-2, p. 1–32, 1928.

SU, W. P.; SCHIRIEFFER, J. R.; HEEGER, A. J. Solitons in polyacetylene. **Physical Review Letters**, v. 42, n. 25, 1979. Disponível em: <<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.42.1698>>.

SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R.; HEEGER, A. J. Soliton excitations in polyacetylene. **Physical Review B**, APS, v. 22, n. 4, p. 2099, 1980.

VELARDE, M. G. From polaron to soliton: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport. **Journal of computational and applied mathematics**, Elsevier, v. 233, n. 6, p. 1432–1445, 2010.

WILSON, A. H. The theory of electronic semi-conductors. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, JSTOR, v. 133, n. 822, p. 458–491, 1931.

---

WILSON, A. H. The theory of electronic semi-conductors. ii. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, JSTOR, v. 134, n. 823, p. 277–287, 1931.

YAMADA, H.; IGUCHI, K. Some effective tight-binding models for electrons in dna conduction: A review. **Advances in Condensed Matter Physics**, Hindawi Publishing Corporation, v. 2010, 2010.

ZALLEN, R. **The physics of amorphous solids**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.

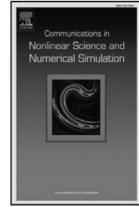
ZENER, C. A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, JSTOR, v. 145, n. 855, p. 523–529, 1934.

**Anexo A - ARTIGO 1:  
ELECTRONIC DYNAMICS  
UNDER EFFECT OF A  
NONLINEAR MORSE  
INTERACTION AND A STATIC  
ELECTRIC FIELD**



Contents lists available at ScienceDirect

Commun Nonlinear Sci Numer Simulat

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/cnsns](http://www.elsevier.com/locate/cnsns)

## Electronic dynamics under effect of a nonlinear Morse interaction and a static electric field

A. Ranciaro Neto<sup>a,b</sup>, F.A.B.F. de Moura<sup>a,\*</sup><sup>a</sup>Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL, 57072-970, Brazil<sup>b</sup>Faculdade de Economia, Administração e Contabilidade, Av. Lourival Melo Mota, s/n, bl. 14. Tabuleiro dos Martins 57072-970, Brazil

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 29 October 2015

Revised 11 April 2016

Accepted 12 April 2016

Available online 20 April 2016

#### PACS:

63.50.+x

63.22.+m

62.30.+d

#### Keywords:

Electric field

Soliton

Morse lattice

### ABSTRACT

Considering non-interacting electrons in a one-dimension alloy in which atoms are coupled by a Morse potential, we study the system dynamics in the presence of a static electric field. Calculations are performed assuming a quantum mechanical treatment for the electronic transport and a classical Hamiltonian model for the lattice vibrations. We report numerical evidence of the existence of a soliton–electron pair, even when the electric field is turned on, and we offer a description of how the existence of such a phase depends on the magnitude of the electric field and the electron–phonon interaction.

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

The issue concerning the time-dependent behavior of an initially localized electronic wave-packet has a direct connection with the electrical properties of materials [1–6]. The seminal works of Anderson and other co-workers have shown that the presence of disorder is a key factor governing the extension of the wave function [7–10]. They demonstrated that in a disordered system with dimension  $d \leq 2$ , all eigenstates become localized in a finite fraction of the system, even in the case of weak disorder. The Anderson localization theory has been developed for electrons. However, such a prediction is valid for any field described by a wave equation. Examples for electromagnetic fields [11], water waves [12] and Bose–Einstein Condensates (BEC) [13] have been reported in the literature. Within the context of BEC, we emphasize that its dynamics is well described by the Gross–Pitaevskii equation [14], and the nonlinearity present in this equation reveals exciting new physical properties [15–17].

Nonlinearity can also be found in electronic systems. Some authors [18] have shown that the interaction between electrons and optical phonons is well described by a nonlinear Schrödinger equation. An interesting nonlinear phenomenon, called self trapping (ST), occurs when the nonlinearity strength exceeds the magnitude of the electronic bandwidth [19–26]. When ST takes place, an initially localized wave-packet does not spread over the system, remaining localized around its initial position. In a wider sense, transport properties in nonlinear lattices have attracted a great deal of interest among the solid state community, as well as within the nonlinear science field [27–74]. Davydov [55–59] came up with the idea

\* Corresponding author. Tel.: +55 82999593909.

E-mail address: [fidelis@fis.ufal.br](mailto:fidelis@fis.ufal.br) (F.A.B.F. de Moura).

that the electron–lattice nonlinear term can promote charge transport. That mechanism is a consequence of the nonlinear interaction between a linear electronic model and a linear lattice, whose dynamics are described by a soliton-bearing equation.

Moreover, in [60–71], Velarde and co-workers have shown the existence of a polaron-soliton “quasi-particle” in nonlinear lattices, and also its importance to the charge carry. The coupling of self-trapped states (polaron states) with the lattice solitons has been generally termed as a solectron [60–71]. We highlight that solectron theory represents a generalization of the original polaron concept that is able to mediate non-Ohmic supersonic electric conduction [68]. The electronic transport mediated by nonlinear effects has been investigated in several two-dimensional anharmonic lattices, particularly in a square lattice similar to the cuprate lattice [71]. They found numerical evidence of electron–soliton transfer along the crystallographic axis.

McNeil and co-workers in ref. [75] provided an interesting experimental advance in electron transport. They were able to move a single electron along a wire, batting it back and forth, like the ball in a ping-pong game. The possibility of using this “controlled motion” within the framework of quantum computing, for example, to move a quantum ‘bit’ between two far places, was noted. This experiment consisted of trapping a single electron in a quantum dot and moving this electron around a channel using a surface acoustic wave (SAW). The authors obtained up to 60 shots with a good quality. The possibility of using SAW to move electrons and to construct quantum bits has attracted the attention of the scientific community [76–82].

It is well known that, in the absence of nonlinearity, a static electric field applied parallel to a periodic lattice promotes the dynamic localization of a given initial wave-packet. Furthermore, the presence of a static electric field gives rise to an oscillatory behavior of the electron wave packet (also called “Bloch oscillations”) [83]. The size of the region over which the electron oscillates and the period of these oscillations are inversely proportional to the magnitude of the static electric field. It is worth mentioning that the effect of an electric field in linear chains of molecules was also studied in [84]. These workers considered the Holstein Hamiltonian under the effect of an electric field. Within the Holstein formalism, the lattice is harmonic and the charge becomes trapped due to the presence of a diagonal term related to the lattice oscillations. In particular, they studied the Bloch oscillations of the trapped state and their association with the electron–phonon coupling.

In this work, we push forward the understanding of electronic transport in low-dimensional nonlinear systems under the effect of a uniform electric field. We develop a numerical study of the non-interacting electron dynamics in a one-dimension alloy where the nearest neighbor atoms are coupled by a Morse potential. In addition, we assume a static electric field parallel to the chain. In such a model, the electron transport is treated quantum-mechanically over the alloy in the tight-binding approximation, and the longitudinal vibrations of the lattice are described using a classical formalism. The electron–phonon interaction is introduced by considering electron hopping as a function of the effective distance between neighboring atoms. By solving numerically the dynamic equations for both the electron and the lattice vibrations, we compute the spreading of an initially localized electronic wave-packet. We report numerical evidence of the existence of an electron–soliton pair, even for the presence of a static electric field. We offer a detailed analysis of the dependence of this electron–soliton pair on the magnitude of the electric field and the electron–phonon interaction.

## 2. Model and numerical calculation

In our work, we consider one electron moving in a 1d anharmonic lattice of  $N$  masses under the influence of a static electric field. Our formalism consists of two parts: a quantum Hamiltonian to treat the electron dynamics, and a classical anharmonic Hamiltonian in order to account for the atomic vibrations. The electronic Hamiltonian  $H_e$  is defined as [54]:

$$H_e = \sum_n [(n - N/2)eE]D_n^\dagger D_n + \sum_n V_{n+1,n}(D_{n+1}^\dagger D_n). \quad (1)$$

It is a typical one-electron Hamiltonian under the effect of a static electric field  $E$ . Here,  $D_n^\dagger$  and  $D_n$  are the creation and annihilation operators for the electron at site  $n$ .  $eE$  represents the electric force on the electron of charge  $e$ .  $(n - N/2)eE$  is the potential energy due to the coupling between the electron and the static electric field  $E$ . In order to avoid dealing with large variations in the magnitude of energy along the chain, we shift to zero the potential energy on the center of the lattice by including the constant  $-eEN/2$ . This is a simple and useful trick that decreases the absolute values of the potential energy, thus improving the numerical stability of our calculations.  $V_n$  is the hopping amplitude.

The atomic lattice in our work is defined by a classical Hamiltonian  $H_{\text{lattice}}$  that considers the nearest neighbor sites coupled by the Morse Potential [52,54]:

$$H_{\text{lattice}} = \sum_n \frac{p_n^2}{2m_n} + C_1 \{1 - \exp[-C_2(q_n - q_{n-1})]\}^2. \quad (2)$$

where  $p_n$  and  $q_n$  are the momentum and displacement of the mass at site  $n$ , respectively.  $C_1$  represents the typical energy of a bond and  $C_2$  is the range parameter of the Morse potential [52,54]. We set  $m_n = 1$  and we obtain a dimensionless representation of the quantities  $q_n$ ,  $p_n$ ,  $H$  by absorbing the constants  $C_1$  and  $C_2$  according to [52,54]:  $q_n \rightarrow C_2 q_n$ ;  $p_n \rightarrow p_n/\sqrt{2C_1}$  and  $H_{\text{lattice}} \rightarrow H_{\text{lattice}}/(2C_1)$ .

Here we follow [52,54] on the interaction between the electron and the vibrational modes. This is considered in our model by relating the electronic parameters  $V_{n+1,n}$  to the displacements of the molecular masses from their equilibrium positions. The hopping elements  $V_{n+1,n}$  depend on the relative distance between two consecutive molecules of the chain

as:  $V_{n+1,n} = -V \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]$ . The quantity  $\alpha$  represents the effective coupling between the relative displacement of lattice units and the hopping term  $V_{n+1,n}$ , or, in other words, it determines the electron–lattice coupling strength (in units of  $1/C_2$ ). For small displacements, we recover the Su et al. approximation  $V_{n+1,n} \approx -V[1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)]$  [27].

The time-dependent wave-function  $|\Phi(t)\rangle = \sum_n f_n(t)|n\rangle$  is obtained by numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation. We consider the electron to be initially localized at site  $N/2$ , i.e.  $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(t=0)|n\rangle$ , where  $f_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$ . The Wannier amplitudes evolve according to the time-dependent Schrödinger equation as ( $\hbar = 1$ )

$$i \frac{df_n(t)}{dt} = [(n - N/2)F]f_n(t) - \tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]f_{n+1}(t) - \tau \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]f_{n-1}(t). \quad (3)$$

The lattice equation can be written as

$$\begin{aligned} \frac{d^2 q_n(t)}{dt^2} = & \{1 - \exp[-(q_{n+1} - q_n)]\} \exp[-(q_{n+1} - q_n)] - \{1 - \exp[-(q_n - q_{n-1})]\} \exp[-(q_n - q_{n-1})] \\ & + \alpha V \{ (f_{n+1}^* f_n + f_{n+1} f_n^*) \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)] - (f_n^* f_{n-1} + f_n f_{n-1}^*) \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})] \} \end{aligned} \quad (4)$$

We stress that we used the formalism defined in [52]. Time is scaled as  $t \rightarrow \Omega t$  where  $\Omega$  is the frequency of harmonic oscillations around the minimum of the Morse potential [52]. Here, the generalized hopping  $\tau = V/(\hbar\Omega)$  determines the time scale difference between the fast electronic dynamics and the slow lattice vibrations.  $F$  is a generalized electric field in dimensionless scale (electric charge, lattice parameter and  $\hbar$  are set as unitary).

The equations governing the electron motion (Eq. (3)) are solved numerically by employing a high-order method based on the Taylor expansion of time evolution operator  $U(\delta t)$  [73,85]:

$$U(\delta t) = \exp(-i\tilde{H}_e \delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-i\tilde{H}_e \delta t)^l}{l!} \quad (5)$$

where  $\tilde{H}_e$  is exactly the same one electron Hamiltonian (Eq. (1)) with normalized hopping  $\tilde{V}_{n+1,n} = -\tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]$ . The wave-function at time  $\delta t$  is given by  $|\Phi(\delta t)\rangle = U(\delta t)|\Phi(t=0)\rangle$ . This method can be used recursively to obtain the wave-function at time  $t$ . To obtain  $\tilde{H}_e^l |\Phi(t=0)\rangle$ , we use a recursive formula derived as follows: let  $\tilde{H}_e^l |\Phi(t=0)\rangle = \sum_n Z_n^l |n\rangle$ . With the Hamiltonian formula (Eq. (1)) we then compute  $\tilde{H}_e^l |\Phi(t=0)\rangle$  and we have  $Z_n^l$  as

$$Z_n^l = [(n - N/2)F]f_n(t=0) - \{\tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]\}f_{n+1}(t=0) - \{\tau \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]\}f_{n-1}(t=0) \quad (6)$$

Therefore, using  $\tilde{H}_e^l |\Phi(t=0)\rangle = \tilde{H}_e \sum_n Z_n^{l-1} |n\rangle$ ,  $Z_n^l$  can be obtained recursively as

$$Z_n^l = [(n - N/2)F]Z_n^{l-1} - \{\tau \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]\}Z_{n+1}^{l-1} - \{\tau \exp[-\alpha(q_n - q_{n-1})]\}Z_{n-1}^{l-1}, \quad (7)$$

The classical equations (Eq. (4)) were solved using a second-order Euler method [86]. The procedure starts with a standard Euler method in order to find a prediction  $q_n(\delta t)^*$  at the time  $\delta t$ :

$$q_n(\delta t)^* \approx q_n(t=0) + \delta t \left. \frac{dq_n}{dt} \right|_{t=0} \quad (8)$$

The next step consists of applying a correction formula to find a better approximation to  $q_n(t + \delta t)$

$$q_n(\delta t) \approx q_n(t=0) + \frac{\delta t}{2} \left[ \left. \frac{dq_n}{dt} \right|_{t=0} + \left. \frac{dq_n}{dt} \right|_{\delta t} \right] \quad (9)$$

This method (Eqs. (8) and (9)) can be used recursively to obtain  $q_n(t)$ . Our main calculations were carried out using  $\delta t = 10^{-3}$ , and the sum of Eq. (5) was truncated on  $n_0 = 15$ . Thus, we obtained the wave-function norm with error  $|1 - \sum_n |f_n(t)|^2| < 10^{-10}$  along the entire time interval. We emphasize that the norm conservation is a first and important check for the accuracy of our numerical procedure. We also performed a second check using a standard fourth-order Runge-Kutta (RK4) [86] to solve Eqs. (3) and (4). The results obtained using our numerical formalism do not show any difference from those obtained using (RK4).

We recognize that the second-order Euler formalism is not the traditional way to solve the classical equation (Eq. (4)). However, we obtained a negligible difference (less than  $10^{-8}$ ) in the atomic position using either RK4 ( $\{q_n^{\text{RK4}}(t)\}$ ) or Euler formalism ( $\{q_n^E(t)\}$ ) at the time interval and for the lattice sizes considered here. Also, the Taylor-Euler method requires, on average, one third of the time of the standard RK4 formalism to achieve the same dynamics. It is worth mentioning that a similar numerical formalism was previously used in [87–89]. In these works, a first-order Euler method was employed to solve the lattice equation, and the quantum equation was solved by numerical calculation of the evolution operator [87–89]. However, they used numerical diagonalization of the complete quantum Hamiltonian in order to obtain the evolution operator. In our formalism, the Taylor expansion was used instead, to allow for studying systems with larger sizes in a shorter computational time.

To quantify the electronic transport on this nonlinear model, we computed some typical quantities; namely, the mean position (centroid) and participation function. These are defined as [73,90]

$$\langle n(t) \rangle = \sum_n (n - N/2) |f_n(t)|^2 \quad (10)$$

and

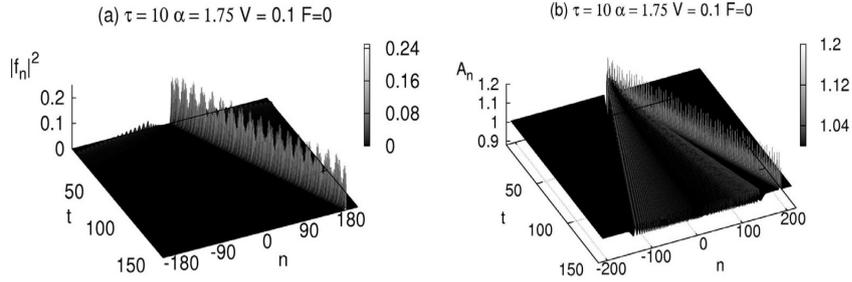


Fig. 1. (a) Squared wave-function component  $|f_n|^2$  versus  $t$  and  $n$  for  $\alpha = 1.75, \tau = 10, V = 0.1$  and  $F = 0$ . (b) Lattice deformation  $A_n$  for the same case as in (a).

$$\xi(t) = 1 / \sum_n |f_n(t)|^4. \quad (11)$$

respectively. The centroid for time  $t$  represents the mean position of the electron using the center of a self-expanded chain as the origin. The participation function provides an estimate of the number of sites under which the wave-packet is spread at time  $t$ .

### 3. Results and discussions

We considered at  $t = 0$  the electron fully localized at the center of a self-expanding chain (i.e.  $\{f_n(t=0) = \delta_{n,N/2}\}$ ). The self-expanding chain was used to minimize border effects; whenever the probability of finding the electron or the atomic vibration at the extremities of the chain exceeded  $10^{-30}$ , 10 new sites were added to each edge. The lattice was initialized using the following initial excitation:  $p_n = \delta_{n,N/2}, q_n = 0$ . Numerical convergence of our calculations was ensured by checking the conservation of the norm of the wave-packet at every time step; our results provide  $|1 - \sum_n |f_n(t)|^2| < 10^{-10}$  for all times considered. At first, we analyzed exactly the same case presented in [52]:  $\tau = 10, \alpha = 1.75, V = 0.1$  and  $F = 0$ , because we want to bring the reader's attention to the electron-soliton pair formation, and because it is an additional way to validate our numerical formalism. We reiterate that the presence of the electric field and its competition with the nonlinear lattice vibration are the main focus of our work. The case without an electric field ( $F = 0$ ) was investigated in [52].

In Fig. 1(a) we plot the electronic wave-function at the  $n \times t \times |f_n|^2$  plane, while in (b) we show the lattice deformation in the  $n \times t \times A_n$  plane for the absence of electric field ( $F = 0$ ), where  $A_n = \exp[-(q_n - q_{n-1})]$ . For those three-dimensional graphics,  $n = 0$  represents the center of the self-expanded chain.

We observe that the wave-function remains trapped in a finite fraction of lattice. In addition, we notice that the localized electronic wave-packet moves along the chain. We also see that there are some tiny spikes that deviate from the center of the chain with a fraction of the wave-packet that remains trapped and moving along the chain. These spikes represent a tiny fraction of the wave-packet that escapes and spreads freely along the nonlinear chain. Similar phenomena are present in the works of Velarde [50–53].

The results for the deformation  $A_n$  reveal that the initial energy propagates along the classical chain in a solitonic state. Our calculations for  $F = 0$  are in agreement with the previous calculations of [52], where this kind of electron-soliton pair was reported for the first time. After having revisited the phenomenology of the electronic dynamics under the effect of nonlinear lattice vibration, we considered the electric field term. As mentioned previously, the calculations for  $F > 0$  and their consequences on the electron-lattice dynamics represent the main novelty of our work.

The effect of the electric field is considered initially by analyzing the same case as in Fig. 1 for  $F > 0$ . Based on the topological profile of the previous case for  $F = 0$ , we notice that the electronic mean position increases with time, and the participation number remains constant. We investigate the effect of electric field on those functions for the same set of parameters considered in Fig. 1. In Fig. 2(a) we show the long-time behavior of the mean position, computed as the average of  $\langle n(t) \rangle$  in the long time limit  $\langle n \rangle = (\sum_{t=0.8t_{max}}^{t_{max}} \langle n(t) \rangle) / N_{times}$  (here  $t_{max} = 2 \times 10^3$ ), versus the magnitude of the electric field  $F$ . For the electric field within the interval ( $0 < F < 2$ ), we observe that  $\langle n \rangle$  is large, thus suggesting that the electron still moves along the chain. However, outside this interval, the electron remains trapped around the initial position. We emphasize here that there is an intricate phenomenology behind these results. Formally, when a static electric field is applied parallel to the chain, the electron should remain trapped around the initial position, performing an oscillatory behavior with a frequency equal to the magnitude of the electric field (i.e. Bloch-oscillation). In our case, we observe that the competition between the static electric field and the electron-soliton term seems to break down the Bloch-oscillations. For  $F > 2$  the electron becomes trapped around the initial position, even in the presence of the electron-soliton term.

Fig. 2(b) shows the long-time mean participation number  $\langle \xi \rangle = (\sum_{t=0.8t_{max}}^{t_{max}} \langle \xi(t) \rangle) / N_{times}$  versus the electric field  $F$ . We observe that, for all electric field values considered, the participation number is small, thus signaling the trapped character of the electron wave-packet. We will return to discuss particularly the behavior of the participation number later.

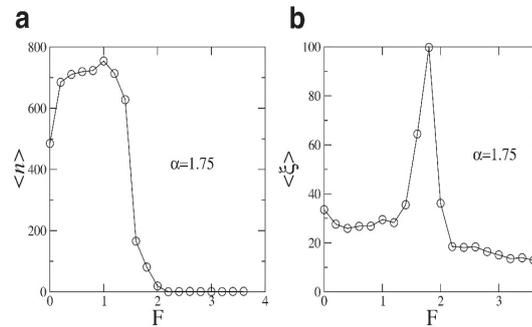


Fig. 2. (a) Electron mean position (centroid) (a) and participation number (b) after a long propagation time versus the electric field magnitude  $F$ .

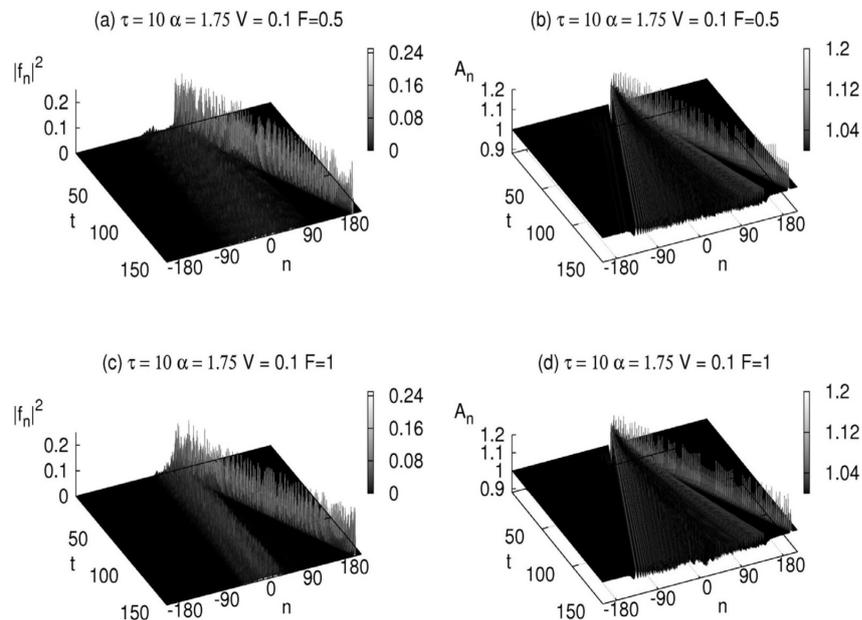
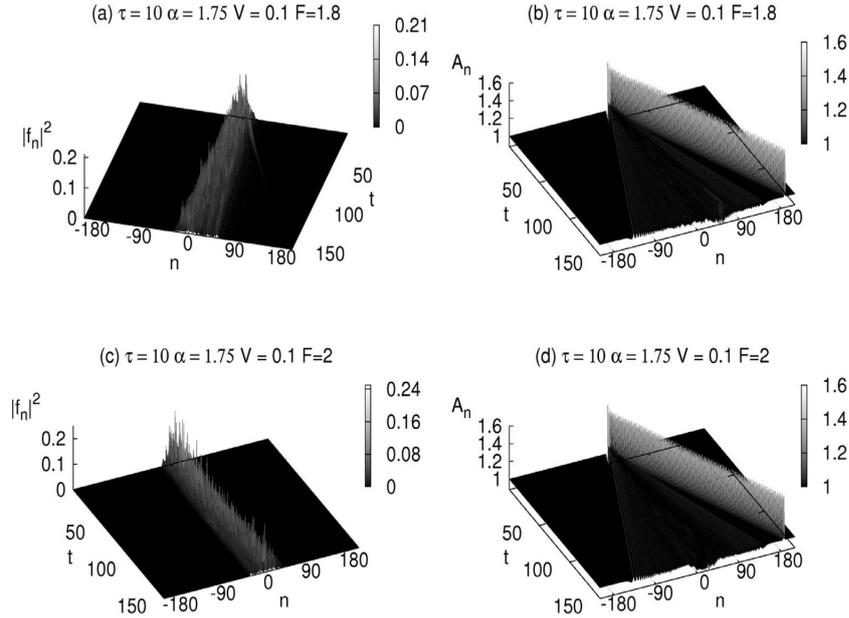


Fig. 3. (a,c) Squared wave-function component  $|f_n|^2$  versus  $t$  and  $n$  for  $\alpha=1.75$ ,  $\tau=10$ ,  $V=0.1$  and  $F=0.5, 1$ . (b,d) Lattice deformation  $A_n$  for the same cases respectively in (a,c).

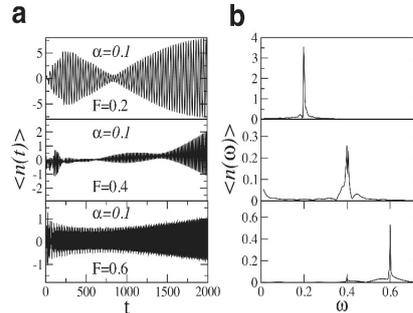
For now, we comment that for  $F \leq 2$ , the electron is trapped by the solitonic modes that exist within the chain. For  $F > 2$ , the electric field effect is dominant and keeps the electron trapped around the initial position. For the electric field within the interval ( $1.5 < F < 2$ ) we found a crossover region in which a finite fraction of the wave-function remains trapped around the initial position, and another small part participates in the electron–soliton dynamics. This crossover effect increases the participation number (as we can observe for example in Fig. 2(b) for  $F \approx 1.8$ ). We obtain a major understanding of the electronic behavior for ( $F \leq 2$ ) by analyzing the wave-packet profile and lattice deformation.

For  $\tau=10$ ,  $\alpha=1.75$  and  $V=0.1$  (i.e. the same as in Fig. 1) and  $F \neq 0$ , the results of wave-packet and the lattice deformation are reported in Figs. 3 and 4. We observe in Fig. 3 for  $F=0.5, 1$  that the wave-function splits into two parts: one moves along the chain and the other (the smallest part) remains trapped around the initial position. Therefore, for a weak electric field, the solitonic mode can still trap a finite fraction of the wave-packet and drag it along the chain. We also observe that the lattice deformation  $A_n$  still exhibits a solitonic behavior. We mention that for  $F > 0$ , the lattice deformations  $A_n$  is minimally modified due to the last term of Eq. (4). This term represents an effective force related to the electronic wave-function. Due to the presence of an electric field, this effective force also depends on the electric field, and thus promotes some small differences in the distribution of lattice deformations.

In Fig. 4 we plot our results for  $F=1.8$  and 2. For  $F=1.8$ , most of the wave-function remains trapped around the initial position. However, a small part of the initial wave-packet seems to still be captured by the solitonic modes. The configuration found for  $1.5 < F < 2$  is distinct from the behavior for  $F=0.5, 1$ . (see Fig. 3) where the major part of the wave-packet remains trapped by the solitonic mode. This is the key ingredient behind the increment in the participation number for  $F=1.8$  (see Fig. 2(b)). Our results suggest that for  $F \leq 1.5$ , it is possible that an electron–soliton pair exists due



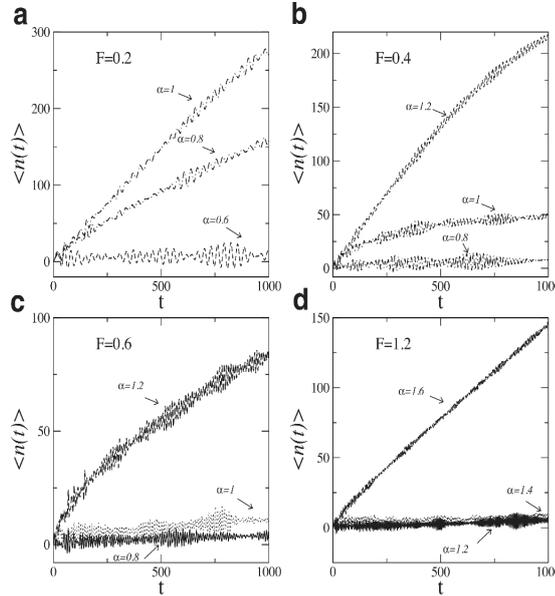
**Fig. 4.** (a,c) Squared wave-function component  $|f_n|^2$  versus  $t$  and  $n$  for  $\alpha = 1.75, \tau = 10, V = 0.1$  and  $F = 1.8, 2$ . (b,d) Lattice deformation  $A_n$  for the same cases respectively in (a,c).



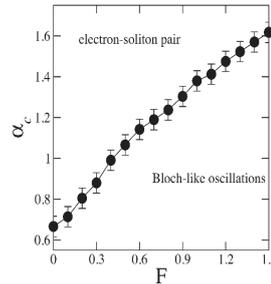
**Fig. 5.** Left panel: the electron centroid for  $\alpha = 0.1$  and  $F = 0.2, 0.4, 0.6$ . Right panel: The Fourier transform  $\langle n(\omega) \rangle$  of the centroid for the same cases showed in the left panel. We observe that for all electric fields considered, the electron position exhibits a Bloch-like oscillatory behavior with frequency ( $\omega \approx F$ ).

to the Morse interaction and the electron–phonon coupling. For  $F > 2$ , the electron becomes localized around the initial position for this degree of electron–phonon coupling. We emphasize that the electron–phonon term  $\alpha = 1.75$  considered in the previous results corresponds to a strong electron–lattice interaction as mentioned in [52]. Moreover, this value is quite close to the higher values of  $\alpha$  that we have considered. Further analysis on electron–phonon interaction values can be found later. The region with  $1.5 < F < 2$  represents an anomalous crossover region in which the electron–phonon term is insufficient to promote the capture of the electron by the solitonic mode, leaving the largest fraction of the wave-packet around the lattice center.

The main conclusion of the previous figures is that, within the framework of a single electron subjected to a static electric field and the electron–phonon coupling, the interaction with the nonlinear lattice vibrations plays a predominant role. We analyze in more detail this competition between the electric field and the electron–phonon coupling now. For example, in Fig. 5(a) we plot the electron position for  $\alpha = 0.1$  and  $F = 0.2, 0.4, 0.6$ . We notice that, for all electric fields considered, the electron exhibits an oscillatory behavior quite compatible with the well-known Bloch oscillation phenomenon. In Fig. 5 (b), we plot the Fourier transform  $\langle n(\omega) \rangle$  of the mean centroid in case (a). The main frequency value is around the electric field magnitude ( $\omega \approx F$ ), which is in good agreement with the semi-classical approach. This is a clear signature that, for a weak electron–phonon interaction, the electric field traps the electron wave-function and promotes a quasi-coherent Bloch-like oscillatory motion. We stress that the oscillatory behavior obtained here is slightly different to the standard Bloch-oscillation [83]. In our model, electronic hopping, even for weak electron–phonon coupling, changes along the chain, thus promoting a weak absence of periodicity that can “destroy” the Bloch oscillations for sufficient long times.



**Fig. 6.** Electronic centroid  $\langle n(t) \rangle$  versus time for  $F = 0.2, 0.4, 0.6, 1.2$  and several values of the electron-phonon coupling  $\alpha$ . We observe that for each electric field considered there is a specific value of  $\alpha$  that separates the phase in which the electron exhibits a Bloch-like oscillation behavior and the phase with the electron-soliton pair formation.



**Fig. 7.** Phase diagram  $\alpha_c \times F$  in order to characterize the (Bloch-like oscillation)/(electron-soliton pair) transition.

However, even considering such possible coherence loss, the electronic localized state exhibits quasi-coherent dynamics with a dominant frequency  $\omega \approx F$ . Now, we analyze the electron-phonon threshold necessary for the electron-soliton pair formation. In Fig. 6(a–d) we plot the electronic centroid  $\langle n(t) \rangle$  versus time for  $F = 0.2, 0.4, 0.6, 1.2$  and several values of electron-phonon coupling  $\alpha$ . We observe that the electron-lattice interaction  $\alpha$  changes the electronic dynamics dramatically. In general, for weak  $\alpha$ , we found a localized wave-packet behavior, while the electron moves along the chain for strong  $\alpha$ . Therefore, our results suggest that  $\alpha$  promotes a transition from a localized state to an electron-soliton pair formation.

We provide in Fig. 7 a phase diagram  $\alpha_c \times F$  in order to characterize the (Bloch-like oscillation)/(electron-soliton pair) transition. Fig. 7 was constructed by monitoring the behavior of  $\langle n(t) \rangle$  and  $\xi(t)$  for each value of  $F$  and  $\alpha$ . The Bloch-like oscillation phase is described by an oscillatory behavior of  $\langle n(t) \rangle$  with dominant frequency  $\omega \approx F$ . Moreover, the participation number is also small due to the localization process imposed by the electric field. The phase with electron-soliton pair formation is mainly characterized by the absence of coherent oscillations and by the continuous increase of the mean position. The electronic mean position is similar to the average position of the lattice deformation, and propagates roughly with the same velocity. The participation number within this phase also saturates in a small value, thus suggesting that the electron is trapped by the soliton. We monitor the value of  $\alpha$  necessary to promote the crossover between these two regimes. The critical point was obtained as  $\alpha_c = \langle \alpha_c \rangle \pm \Delta\alpha_c$ , with tolerance  $\Delta\alpha_c \approx 0.05$ . For  $\alpha > \alpha_c$ , we have the phase with electron-soliton pair and for  $\alpha < \alpha_c$  we have the phase with Bloch-like oscillations. For  $\alpha$  values within the interval  $[\langle \alpha_c \rangle - \Delta\alpha_c, \langle \alpha_c \rangle + \Delta\alpha_c]$  we found a crossover region between both phases.

We also observe that, even in the absence of an electric field ( $F = 0$ ), there is a minimum value of the nonlinearity ( $\alpha_c \approx 0.65 \pm 0.05$ ) necessary to bind the electron to the solitonic mode of the chain. Although the case with  $F = 0$  was investigated in [52], the critical value of the electron-lattice interaction necessary to promote the electron-soliton pair has not been hitherto reported. In the absence of an electric field and small  $\alpha$  ( $\alpha < \alpha_c$ ) the electronic dynamics exhibits an

interesting behavior: a large fraction of the wave-packet remains free to move along the chain, and a tiny fraction of the wave-packet is trapped by the solitonic mode. Therefore, for weak electron-phonon coupling, the solitonic mode is unable to capture the electron efficiently and drive it at the same soliton velocity. We also observe in Fig. 7 that, as the electric field value  $F$  is increased, the critical electron-phonon value  $\alpha_c$  also increases. For  $F \neq 0$ , dynamic localization in general takes place. The interaction of the electron with the static electric field promotes the appearance of a linear potential energy that traps the electron around the initial position and induces Bloch-like oscillations. As the electric field increases, it becomes more difficult for the electron-phonon term to capture a large fraction of the electron wave; thus  $\alpha_c$  should increase also (as observed in Fig. 7).

For  $F > 2$ , the electron becomes roughly trapped and the electron-phonon coupling, within our numerical accuracy, cannot promote the pair formation. For the electric field within the interval ( $1.5 < F < 2$ ), as was described previously, we found a crossover region in which a larger fraction of the wave-function remains trapped around the initial position, and a smaller part joins the electron-soliton dynamics. In our calculations, we found good accuracy until  $\alpha \approx 2$ . Perhaps for electron-phonon couplings larger than  $\alpha = 2$ , electron-soliton pair formation could happen also for  $F > 1.5$ . However, it is difficult to solve the set of quantum/classical equations for large electric fields and electron-phonon interaction. We tried to solve the model at this limit ( $1.5 < F < 2$  and  $\alpha > 2$ ) using another high-order integrator (the fourth- (RK4) and also eighth- (RK8) order Runge-Kutta methods). Even with those high-order methods, we did not find sufficient accuracy to perform a definitive analysis. In [51,53,53], the limit  $\alpha > 2$  was also avoided.

#### 4. Conclusions

In this work, we studied one-electron dynamics in a one-dimensional Morse model considering a static electric field applied parallel to the chain. Also, we assumed the electron to be described by a quantum-mechanical formalism, while the longitudinal vibrations of the lattice are treated classically. The electron-phonon interaction was introduced by considering the hopping between neighboring sites to be dependent on their relative distance.

By solving numerically the equations for the electron and lattice, we have computed the dynamics of an initially localized electronic wave-packet. Our results can be summarized as follows: for a weak electric field, our calculations have revealed evidence of electron-soliton pair formation. We also found, by numerical means, that the electron-phonon coupling dominates the dynamics, thus destroying the Bloch-oscillation phenomenon. For strong electric fields, the wave-packet remains trapped around the initial position. The solitonic lattice deformations exhibit small losses and remain trapped due to the electric field competitive effect.

We also analyzed in more detail the competitive process between the electric field and the electron-phonon coupling by examining the critical value of the electron-phonon interaction necessary to promote the electron-soliton pair formation under the effect of a static electric field. By monitoring the electronic dynamics for a range of  $F$  and  $\alpha$  values, we provided a phase diagram in order to characterize the transition between both phases (viz. Bloch-like oscillation/electron-soliton pair). We found the critical electron-phonon interaction necessary to promote the damping of the Bloch-oscillatory behavior and to stabilize a mobile electron-soliton pair. We hope that our work motivates additional investigation within the problem of electronic dynamics under the effect of an electric field and electron-phonon term. There are some interesting and challenging related questions, such as the role played by the electron-electron interaction and by lattice topology.

#### Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), CNPq-Rede Nanobioestruturas, as well as FAPEAL(Alagoas State Agency). We are grateful to Profs. Drs. M.L. Lyra and M.G.Velarde for useful discussions, corrections and suggestions.

#### References

- [1] Cheni D, Molina MI, Tsironis GP. *J Phys Cond Matter* 1993;5:8689.
- [2] Silva AFG, Lima RPA, Chaves V, de Moura FABF, Lyra ML. *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat* 2016;30:101.
- [3] Longhi S. *J Phys Condens Matter* 2014;26:255504.
- [4] Longhi S. *J Phys Condens Matter* 2012;24:435601.
- [5] Longhi S, Szameit A. *J Phys Condens Matter* 2013;25:035603.
- [6] Kramer B, MacKinnon A. *Rep Prog Phys* 1993;56:1469; Ziman TAL. *Phys Rev Lett* 1982;49:337.
- [7] Abrahams E, Anderson PW, Licciardello DC, Ramakrishnan TV. *Phys Rev Lett* 1979;42:673.
- [8] Anderson PW. *Phys Rev* 1958;109:1492.
- [9] Anderson PW. *Science* 1972;177:393–6.
- [10] Anderson PW. *Philos Mag B*. 1985;52:505–9.
- [11] Wiersma DS, Paolo Bartolini, Ad Lagendijk and Roberto Righini, *Nature* 1997;390:671.
- [12] Billy J. *Nature* 2008;453:891.
- [13] Roati G. *Nature* 2008;453:895.
- [14] Dalfvo F, Giorgini S, Pitaevskii LP, Stringari S. *Rev Mod Phys* 1999;71:463.
- [15] Ryu C, Andersen MF, Vaziri A, dArcy MB, Gross-man JM, Helmerson K, et al. *Phys Rev Lett* 2006;96:160403.
- [16] Behinaein G, Ramareddy V, Ahmadi P, Summy GS. *Phys Rev Lett* 2006;97:244101.
- [17] Johansson M, Hörnquist M, Riklund R. *Phys Rev B* 1995;52:231.
- [18] Datta PK, Kundu K. *Phys Rev B* 1996;53:14929.
- [19] Kopidakis G, Komineas S, Flach S, Aubry S. *Phys Rev Lett* 2008;100:084103.

- [20] Skokos C, Krimer DO, Komineas S, Flach S. Phys Rev E 2009;79:056211. Rev. E 89, (2014) 029907.
- [21] Pan Z, Xiong S, Gong C. Phys Rev E 1997;56:4744.
- [22] de Moura FABF, Gléria I, dos Santos IF, Lyra ML. Phys Rev Lett 2009;103:096401.
- [23] Iomin A. Phys Rev. E 2010;81:017601.
- [24] Caetano RA, de Moura FABF, Lyra ML. Eur Phys J B 2011;80:321.
- [25] Tietsche S, Pikovsky A. Europhys Lett 2008;84:10006.
- [26] Dias WS, Lyra ML, de Moura FABF. Eur Phys J B 2012;85:7.
- [27] Su WP, Schrieffer JR, Heeger AJ. Phys Rev Lett 1979;42:1698.
- [28] Skokos C, Flach S. Phys Rev E 2010;82:016208.
- [29] Ivanchenko MV, Laptyeva TV, Flach S. Phys Rev Lett 2011;107:240602.
- [30] Skokos C, Gkolias I, Flach S. Phys Rev Lett 2013;111:064101.
- [31] Bodyfelt JD, Laptyeva TV, Gligoric G, Krimer DO, Skokos C, Flach S. Int J Bifurc Chaos 2011;21:2107–24.
- [32] Flach S. Nonlinear Dynamics: Materials, Theory and Experiments. Springer Proceedings in Physics 2016;173:45.
- [33] Laptyeva TV. J Phys A 2014;47:493001.
- [34] Pikovsky A. J Stat Mech Theory Exp 2015:P08007.
- [35] de Moura FABF, Gléria I, dos Santos IF, Lyra ML. Phys Rev Lett 2009;103:096401.
- [36] de Moura FABF, Vidal EJGG, Gléria I, Lyra ML. Phys Lett A 2010;374:4152.
- [37] de Moura FABF, Caetano RA, Santos B. J Phys: Condens Matter 2012;24:245401.
- [38] Pan Z, Xiong S, Gong C. Phys Rev E 1997;56:4744; Yamada H, Iguchi K. Adv Cond Mat Phys 2010;2010:380710.
- [39] Kopidakis G, Komineas S, Flach S, Aubry S. Phys Rev Lett 2008;100:084103; Pikovsky AS, Shepelyansky DL. Phys Rev Lett 2008;100:094101; Hajnal D, Schilling R. Phys Rev Lett 2008;101:124101; Lahini Y, Avidan A, Pozzi F, Sorel M, Morandotti R, Christodoulides DN. Phys Rev Lett 2008;100:029907.
- [40] Skokos C, Krimer DO, Komineas S, Flach S. Phys Rev E 2009;79:056211; Skokos C, Krimer DO, Komineas S, Flach S. Phys Rev E 2014;89:029907.
- [41] Leykam D, Flach S, Bahat-Treidel O, Desyatnikov AS. Phys Rev B 2013;88:224203; Gligoric G, Rayanov K, Flach S. EPL 2013;101:10011.
- [42] Laptyeva TV, Bodyfelt JD, Flach S. EPL 2012;98:60002; Larcher M, Laptyeva TV, Bodyfelt JD, Dalfovo F, Modugno M, Flach S. New J Phys 2012;14:103036.
- [43] Xue J-K, Zhang A-X. Phys Rev Lett 2008;101:180401; Akhmediev N, Ankiewicz A, Soto-Crespo JM. Phys Rev E 2009;80:026601; Ponomarenko SA, Agrawal GP. Phys Rev Lett 2006;97:013901; Maluckov A, Hadzievski Lj, Lazarides N, Tsironis GP. Phys Rev E 2009;79:025601(R); Lahini Y, Avidan A, Pozzi F, Sorel M, Morandotti R, Christodoulides DN. Phys Rev Lett 2008;100:013906; Anker Th, Albiez M, Gati R, Hunsmann S, Eiermann B, Trombettoni A. Phys Rev Lett 2005;94:020403.
- [44] Su WP, Schrieffer JR, Heeger AJ. Phys Rev Lett 1979;42:1698; Su WP, Schrieffer JR, Heeger AJ. Phys Rev B 1980;22:2099; Heeger AJ, Kivelson S, Schrieffer JR, Su W-P. Reviews of Modern Physics 1988;60:781.
- [45] Pan Z, Xiong S, Gong C. Phys Rev B 1997;56:1063.
- [46] Macías-Díaz JE, Medina-Ramírez IE. Commun Nonlinear Sci Numer Simul 2009;14:3200.
- [47] Zabusky NJ. Chaos 2005;15:015102.
- [48] Dauxois T, Peyrard M, Ruffo S. Eur J Phys 2005;26:S3–S11.
- [49] Brizhik L, Chetverikov AP, Ebeling W, Röpke G, Velarde MG. Phys Rev B 2012;85:245105.
- [50] Chetverikov AP, Ebeling W, Velarde MG. Physica D 2011;240:1954.
- [51] Hennig D, Velarde MG, Ebeling W, Chetverikov AP. Phys Rev E 2008;78:066606.
- [52] Hennig D, Chetverikov A, Velarde MG, Ebeling W. Phys Rev E 2007;76:046602.
- [53] Makarov V, Velarde MG, Chetverikov AP, Ebeling W. Phys Rev E 2006;73:066626.
- [54] Hennig D, Neissner C, Velarde MG, Ebeling W. Phys Rev B 2006;73:024306.
- [55] Davydov AS. Solitons in Molecular Systems. 2nd ed. Reidel, Dordrecht; 1991.
- [56] Scott AC. Phys Rep 1992;217:1–67.
- [57] Davydov AS. Physica Scripta 1979;20:387–94.
- [58] Davydov AS. J Theor Biol 1977;66:379–87.
- [59] Davydov AS. Biology and quantum mechanics. Pergamon, New York; 1982.
- [60] Alder BJ, Runge KJ, Scalettar RT. Phys Rev Lett 1997;79:3022.
- [61] Brizhik LS, Eremko AA. Physica D 1995;81:295–304.
- [62] Ross OGC, Cruzeiro L, Velarde MG, Ebeling W. Eur Phys J B 2011;80:545–54.
- [63] Velarde MG, Neissner C. Int J Bifurc Chaos 2008;18:885–90.
- [64] Velarde MG, Ebeling W, Chetverikov AP. Int J Bifurc Chaos 2011;21:1595–600.
- [65] Chetverikov AP, Ebeling W, Velarde MG. Eur Phys J B 2011;80:137–45.
- [66] Hennig D, Velarde MG, Ebeling W, Chetverikov A. Phys Rev E 2007;78:066606.
- [67] Velarde MG, Ebeling W, Chetverikov AP. Internat J Bifurc Chaos 2005;15:245.
- [68] Velarde MG. J Comput Appl Math 2010;233:1432.
- [69] Velarde MG, Ebeling W, Chetverikov AP. Eur Phys J B 2012;85:291.
- [70] Ebeling W, Chetverikov AP, Röpke G, Velarde MG. Contrib Plasma Phys 2013;53:736.
- [71] Chetverikov AP, Ebeling W, Velarde MG. Eur Phys J Spec Topics 2013;222:2531.
- [72] Velarde MG, Chetverikov AP, Ebeling W, Wilson EG, Donovan KJ. EPL 2014;168:27004.
- [73] Sales MO, de Moura FABF. J Phys Condens Matter 2014;26:415401.
- [74] Sales MO, Fulco UL, Lyra ML, Albuquerque EL, de Moura FABF. J Phys Condens Matter 2015;27:035104.
- [75] McNeil RPG, Kataoka M, Ford CJB, Barnes CHW, Anderson D, Jones GAC, et al. Nature 2011;477:439–42.
- [76] Barnes CHW, Shilton JM, Robinson AM. Phys Rev B 2000;62:8410.
- [77] Astley MR, Kataoka M, Ford CJB, Barnes CHW, Anderson D, Jones GAC, et al. Phys Rev Lett 2007;99:156802.
- [78] Sanada H, Sogawa T, Gotoh H, Onomitsu K, Kohda M, Nitta J, et al. Phys Rev Lett 2011;106:216602.
- [79] Astley MR, Kataoka M, Ford CJB, Barnes CHW, Anderson D, Jones GAC, et al. Physica E 2008;40:1136.
- [80] Volk S, Schüleïn FJR, Knall F, Reuter D, Wieck AD, Truong TA, et al. Nano Lett 2010;10:3399.
- [81] Schüleïn FJR, Müller K, Bichler M, Koblmüller G, Finley JJ, Wixforth A, et al. Phys Rev B 2013;88:085307.
- [82] Neto AR, Sales MO, de Moura FABF. Solid State Commun 2016;229:22.
- [83] Domínguez-Adame F, Malyshev VA, de Moura FABF, Lyra ML. Phys Rev Lett 2003;91:197402.
- [84] Lakhnoa VD, Korshunova AN. Eur Phys J B 2007;55:85.
- [85] de Moura FABF. Int J M Phys C 2011;22:63.
- [86] Hairer E, Nørsett SP, Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems. 3rd ed. New York: (Springer Series in Computational Mathematics); 2007; Press WH, Flannery WP, Teukolsky SA, Wetterling WT. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. 3rd ed. New York: Cambridge University Press; 2007.
- [87] Lima MP, Silva GMe. Phys Rev B 2006;74:224304.
- [88] Silva GMe, de Brito AN, Correia N. Phys Rev B 1996;53:7222.
- [89] Ribeiro LA Jr, Cunha Wfd, Fonseca ALA, Silva GMe, Stafström S. J Phys Chem Lett 2015;6:510.
- [90] dos Santos JLL, Nguyen BP, de Moura FABF. Physica A 2015;435:15–21.

**Anexo B - ARTIGO 2:  
ELECTRONIC TRANSPORT IN  
DISORDERED CHAINS  
MEDIATED BY INTERACTIONS  
WITH ACOUSTIC WAVES**



Contents lists available at ScienceDirect

Solid State Communications

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/ssc](http://www.elsevier.com/locate/ssc)

Fast-track Communication

## Electronic transport in disordered chains mediated by interactions with acoustic waves

A. Ranciaro Neto<sup>a,b</sup>, M.O. Sales<sup>a</sup>, F.A.B.F. de Moura<sup>a,\*</sup><sup>a</sup> Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió AL 57072-970, Brazil<sup>b</sup> Faculdade de Economia, Administração e Contabilidade, Av. Lourival Melo Mota, s/n, bl. 14. Tabuleiro dos Martins 57072-970, Brazil

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 16 November 2015

F. Peeters

Available online 2 January 2016

#### Keywords:

wave-packet dynamics

disorder

acoustic waves

electron-phonon

### ABSTRACT

We considered the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered chains under the effect of electron–phonon interaction and an acoustic wave's pumping. Our procedure consists of a quantum mechanics formalism for the electron transport and a classical Harmonic Hamiltonian model for lattice vibrations. We also introduce an electron–lattice interaction by assuming electron energy transfer between neighboring atoms as an exponential function of its effective distance. In our model, the electron was initially localized at the first site of the chain and we also added pumping of an acoustic wave at the zeroth site. We solved numerically the dynamic equations for the electron and lattice performing calculations for the spreading of an electronic wave-packet. We report numerical evidences with regard to the sub-diffusive transport.

© 2015 Elsevier Ltd. All rights reserved.

### 1. Introduction

In the end of 1950s P.W. Anderson and co-workers demonstrated that extended eigenstates are completely absent in low-dimensional systems with uncorrelated disorder [1–7]. One of its consequences result in the saturation of the width of an initially localized wave-packet at a finite region around the initial position in the long time limit. Some years ago, it was demonstrated that the competition between nonlinearity and disorder plays an interesting role within the electronic transport [8–36]. By using a wide range of techniques, authors had shown that, even in the presence of disorder, nonlinearity can promote the appearance of a counter-intuitive electronic transport. From an experimental point of view, within the context of coupled waveguides patterned on an AlGaAs substrate, the presence of nonlinearity enhances the localization of linear modes whereas it induces the delocalization of nonlinear modes [13]. It is also interesting to emphasize the results of M.G. Velarde and co-workers [22–33] on the possibility of electronic transport mediated by a new type of electron-soliton pair.

Within the context of electron transport mediated by nonlinearity or electron–phonon interaction, the problem involving surface acoustic wave (SAW) has attracted an intense interest. In

general lines, SAW has been used to control electronic dynamics in nano-devices. One of the best observations of electronic transport induced by SAW was experimentally done in Ref. [37]. The authors applied a surface acoustic wave through a GaAs–AlGaAs two-dimensional electron gas. In Ref. [38], an interesting investigation of the electronic flux mediated by high frequency (SAW) in GaAs–AlGaAs heterostructures was reported. In a recent excellent experiment [39], the authors moved a single electron along a wire to mimic a kind of ping-pong behavior. Moreover, it was pointed out that “controlled motion” might be used within the framework of quantum computing for moving a quantum ‘bit’ between two far from places [39]. The experimental setup consisted of trapping a single electron in a quantum dot and moved this electron around a channel by using a SAW. The authors obtained up to 60 shots with good quality. The possibility of using SAW to move electrons and construct quantum bits has attracted an intense interest [40–43].

We considered the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered chain under the effect of electron–phonon interaction and an acoustic wave's pumping. Our formalism consists of a quantum mechanics formalism for the electron transport and a classical harmonic Hamiltonian model for the lattice vibrations. We also introduce an electron–lattice interaction by considering electron energy transfer between neighboring atoms as an exponential function of its effective distance. In our model we made the electron initially localized at the first site of the chain and we added the pumping of an acoustic wave at the

\* Corresponding author.

E-mail address: [fidelis@fis.ufal.br](mailto:fidelis@fis.ufal.br) (F.A.B.F.de. Moura).

zero site. We solved numerically the dynamic equations for the electron and lattice performing calculations for the spreading of the electronic wave-packet. We report numerical evidences of the sub-diffusive transport.

## 2. Model and formalism

In our work the formalism consists of two Hamiltonians: the quantum electronic and lattice vibration dynamics. The electron Hamiltonian ( $H_e$ ) and the lattice Hamiltonian  $H_{lattice}$  are described, respectively, by

$$H_e = \sum_{m=1}^N \epsilon_m f_m^\dagger f_m + \sum_{m=1}^N \tau_{m+1,m} (f_{m+1}^\dagger f_m + f_m^\dagger f_{m+1}) \quad (1)$$

and

$$H_{lattice} = \frac{p_m^2}{2M_m} + \frac{1}{4} \sum_{m=1}^N [(x_{m+1} - x_m)^2 + (x_m - x_{m-1})^2], \quad (2)$$

where  $\epsilon_m$  represents the on-site disorder distribution uniformly chosen within the interval  $[-W/2, W/2]$ ,  $\tau_{m+1,m}$  represents the energy transfer between the nearest sites,  $M_m$  represents the disordered distribution of masses and  $x_m$  and  $p_m = M_m \dot{x}_m$  represents the atomic position and the momentum of the  $m$ th site.  $M_m$  is generated by using the following procedure:  $M_m = e^{|\eta_m|}$  where  $\eta_m$  are random numbers uniformly distributed within a range  $[-W/2, W/2]$ . Electron-lattice interaction will be constructed by considering the electronic hopping term as  $\tau_{m+1,m} = -e^{i[-\alpha(x_{m+1} - x_m)]}$  where  $\alpha$  represents, in units of the lattice spacing, the electron-phonon term. For small relative displacement we recover the Su, Schrieffer, Heeger approximation  $\tau_{m+1,m} \approx -[1 - \alpha(x_{m+1} - x_m)]$ . The time-dependent wave function  $\Phi(t) = \sum_m c_m(t) |m\rangle$  is obtained by numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation. The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent Schrödinger equation as ( $\hbar = 1$ )

$$i \frac{dc_m(t)}{dt} = \epsilon_m c_m(t) - e^{i[-\alpha(x_{m+1} - x_m)]} c_{m+1}(t) - e^{i[-\alpha(x_m - x_{m-1})]} c_{m-1}(t). \quad (3)$$

The classical equations governing the lattice vibrations may be written as

$$M_m \frac{d^2 x_m}{dt^2} = x_{m+1} - 2x_m + x_{m-1} - \alpha \{ e^{i[-\alpha(x_{m+1} - x_m)]} (c_{m+1}^*(t) c_m(t) + c_{m+1}(t) c_m^*(t)) - e^{i[-\alpha(x_m - x_{m-1})]} (c_m^*(t) c_{m-1}(t) + c_m(t) c_{m-1}^*(t)) \}. \quad (4)$$

We impose the electron initially localized at site  $m=1$ , i.e.  $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_m c_m(t=0) |m\rangle$ , where  $c_m(t=0) = \delta_{m,1}$ . For  $t=0$  we set  $x_m(t=0) = \dot{x}_m(t=0) = 0$  for  $m$  within the interval  $[1, N]$ . Furthermore, we consider the pumping of an acoustic wave at the extreme left side of the chain (i.e. at the site  $m=0$ ) given by the equation

$$x_0 = A_0 \cos(\omega t), \quad (5)$$

where  $\omega$  represents the frequency of the acoustic wave. We solve the set of quantum/classical coupled equations using combined high-order Taylor expansion and a second order finite-difference procedure. The former is employed to obtain a numerical solution of Schrödinger equation (Eq. (3)) via series expansion of the evolution operator  $U(\Delta t)$  [44]:

$$U(\Delta t) = \exp(-iH_e \Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH_e \Delta t)^l}{l!} \quad (6)$$

where  $H_e$  is the one electron Hamiltonian. The wave function at time  $\Delta t$  is given by  $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t) |\Phi(t=0)\rangle$ . The method can be used recursively to obtain the wave-function at time  $t$ . Classical equations (Eq. (4)) are solved by using the latter approach on a discretized time. We write the second time derivative in Eq. (4) as

$$\frac{d^2 x_m}{dt^2} \approx \frac{x_m(t + \Delta t) - 2x_m(t) + x_m(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} \quad (7)$$

Applying the previous formula to the classical equation we derive the following equation which can be solved numerically:

$$x_m(t + \Delta t) \approx 2x_m(t) - x_m(t - \Delta t) + \frac{(\Delta t)^2}{M_m} \{ x_{m+1}(t) - 2x_m(t) + x_{m-1}(t) - \alpha [ e^{i[-\alpha(x_{m+1}(t) - x_m(t))]} (c_{m+1}^*(t) c_m(t) + c_{m+1}(t) c_m^*(t)) - e^{i[-\alpha(x_m(t) - x_{m-1}(t))]} (c_m^*(t) c_{m-1}(t) + c_m(t) c_{m-1}^*(t)) ] \}, \quad (8)$$

Our calculations are made with step  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$  and the sum of Eq. (6) is truncated at  $n_0 = 10$ . Then we could keep the wave function norm within the following numerical tolerance:  $|1 - \sum_m |c_m(t)|^2| < 10^{-10}$  along the entire time interval ( $t_{max} \approx 3 \times 10^4$ ). After solving the dynamics equations, we computed some typical quantities which describe electronic transport on this disordered model, namely, mean position (centroid) and mean square displacement defined as [34–36]

$$\langle m(t) \rangle = \sum_m |m\rangle |c_m(t)|^2 \quad (9)$$

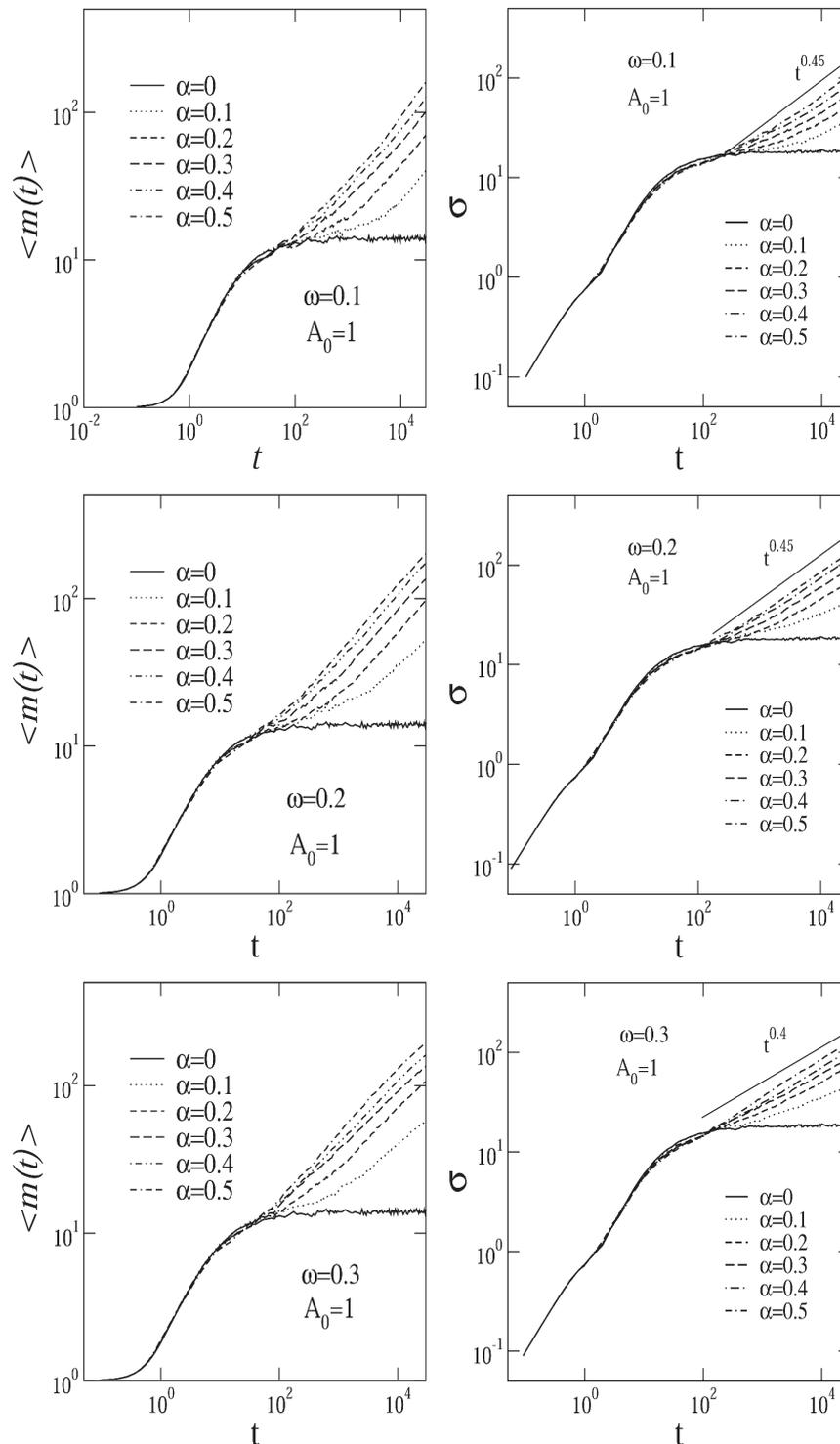
and

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_m (m - \langle m(t) \rangle)^2 |c_m(t)|^2}, \quad (10)$$

respectively. The centroid for a given time  $t$  represents the mean position of the electron using the center of a self-expanded chain as the origin. The mean square displacement provides an estimate of the size of the wave packet at time  $t$ .

## 3. Results and discussion

We considered the electron fully localized at the left side of the chain (i.e.  $\langle c_m(t=0) = \delta_{m,1} \rangle$ ) and the pumping of an acoustic wave at the site  $m=0$  i.e.  $x_0 = A_0 \cos(\omega t)$ , where  $\omega$  represents the frequency of the acoustic wave. We set  $W=2$  for all calculations obtained in Figs. 1–3. Due to the presence of a mass disordered distribution in our model, we adopted pumping at low-frequencies  $\omega \ll 1$ . High frequencies do not propagate easily within disordered harmonic chains [45]. In our calculations we have used the self-expanding chain to minimize border effects; whenever the probability of finding the electron or the atomic vibration at the right side of the chain exceeded  $10^{-20}$ , 10 new sites were added to the right side. Numerical convergence was ensured by checking the conservation of the norm of the wave packet at every time step; our results provide  $|1 - \sum_m |c_m(t)|^2| < 10^{-10}$  for all times considered. In Fig. 1 we show results of several calculations for  $\omega = 0.1, 0.2, 0.3$  and  $\alpha = 0$  up to 0.5. For  $\alpha = 0$  we detected clearly that the electron remains localized close to initial position. We emphasize that in the absence of electron-phonon coupling ( $\alpha = 0$ ) our present model converged to the standard one-dimensional Anderson model with diagonal disorder of the same order of the bandwidth. Therefore, in this case the electronic behavior is characterized by exponentially localized eigenstates, thus promoting the saturation of  $\sigma$  and  $\langle m(t) \rangle$  at long time limit. For  $\alpha > 0$  we observed that the square root of the mean square displacement and the mean position increases with time. We also noticed that  $\sigma \propto t^\zeta$  with  $\zeta = 0.4 - 0.45$  i.e., a sub-diffusive behavior. The calculations in Fig. 1 suggest a disruption of the Anderson



**Fig. 1.** The mean position and mean square displacement computed for  $\omega = 0.1, 0.2, 0.3$  and  $\alpha = 0$  up to 0.5. The amplitude of the pumping was set at  $A_0 = 1$ . For  $\alpha > 0$  we can see that both  $m(t)$  and  $\sigma(t)$  increases along the time. Our calculations suggest that the coupling of the electron with the acoustic mode pumped in the left side of chain promotes the breakdown of the Anderson localization.

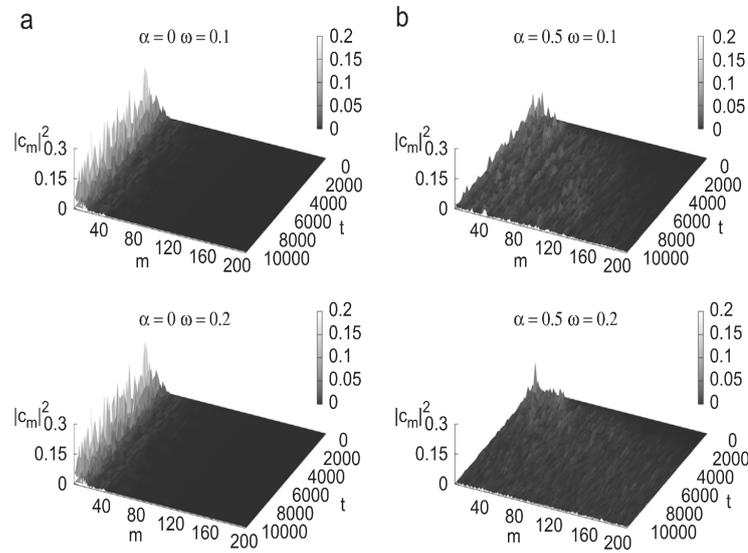


Fig. 2.  $|c_m(t)|^2$  versus  $t$  and  $m$  for  $\omega=0.1, 0.2$  and  $\alpha=0, 0.5$ .

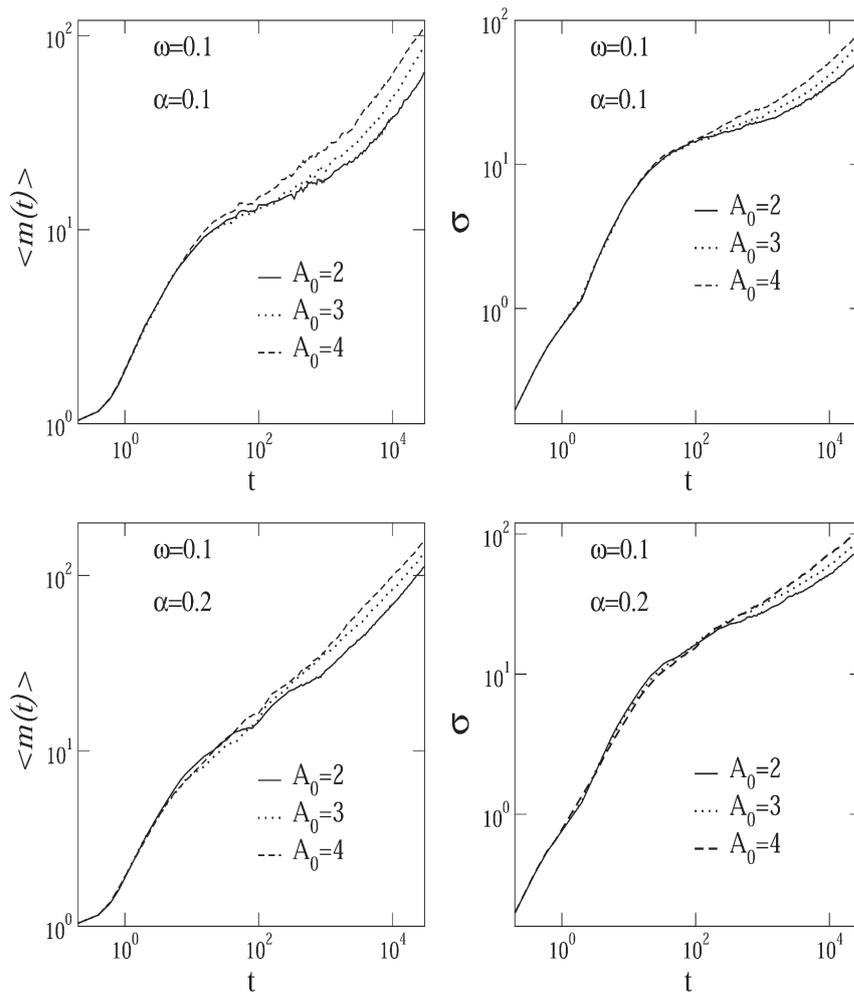


Fig. 3. The electronic centroid  $\langle m(t) \rangle$  and the spread of the wave packet  $\sigma$  versus time for  $\omega=0.1$ ,  $\alpha=0.1, 0.2$  and  $A_0=2, 3, 4$ .

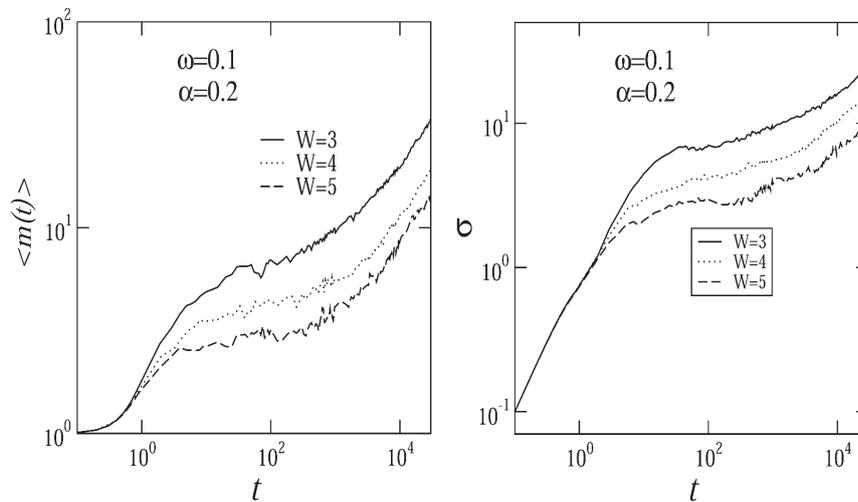


Fig. 4. The electronic centroid  $\langle m(t) \rangle$  and the spread of the wave packet  $\sigma$  versus time for  $\omega=0.1$ ,  $\alpha=0.2$ ,  $A_0=1$  and  $W=3, 4, 5$ .

localization induced by the coupling with acoustic mode pumped in the left side of chain. It is an interesting result. In general lines, the injection of the acoustic wave in one of the ends of the chain associated with the electron–phonon coupling promotes the electronic propagation even at the presence of strong diagonal disorder. The acoustic wave seems to “push” the electron through the disordered chain. In Fig. 2 we plot  $|c_m(t)|^2$  versus  $t$  and  $m$  for  $\omega=0.1, 0.2$  and  $\alpha=0, 0.5$ . We noticed that for  $\alpha=0$  the wave-packet remains localized close to the left side of chain. For  $\alpha=0.5$  we observed that the wave-packet spreads along the chain. The results shown in Fig. 2 are in good agreement with Fig. 1 thus suggesting that the coupling between the electron and the acoustic mode developed electronic transport. In Fig. 3 we analyzed briefly the effect of the pumping amplitude  $A_0$  on the electronic transport. We plotted the electronic position  $\langle m(t) \rangle$  and the wave-packet width  $\sigma$  versus time for  $\omega=0.1$ ,  $\alpha=0.1, 0.2$  and  $A_0=2, 3, 4$ . Our calculations suggest a small increment of both quantities as the pumping amplitude  $A_0$  increases. However, in general lines, the main results seemed to be qualitatively independent of the pumping amplitude  $A_0$ . Therefore the main summary of results shown in Figs. 1–3 suggests that, within the harmonic approximation, the coupling between the electron and a acoustic mode promote electronic dynamics. We emphasize that in our model we have considered a reasonable amount of disorder ( $W=2$ , i.e. the same order of the crystalline electronic bandwidth). We also emphasize that our results shown in the previous figures point out that even in the presence of intermediate amount of disorder, the acoustic wave mediates electron wave-packet dynamics along the chain. So this brings up the question: What happens at the limit of strong disorder? In Fig. 4 we included additional calculations for a more intense amount of disorder. We plotted the electronic position  $\langle m(t) \rangle$  and the wave packet width for  $\omega=0.1$ ,  $\alpha=0.2$  and  $W=3, 4, 5$ . We emphasize that this threshold can be considered a strong disordered limit in one-dimensional chains (in special  $W=5$ ). Our results denote again that the electron transport is maintained even in this case. We observed that the diffusion constant in fact decreases as the disorder parameter increases. However, both quantities have shown a subdiffusive behavior similar to those obtained in the previous calculations.

#### 4. Summary and conclusions

In this work we have considered the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered chain under effect of electron–phonon interaction and the acoustic wave’s pumping. Our formalism consists of describing quantum electronic dynamics within the disordered chain and lattice vibration by two distinct Hamiltonians. The electron–lattice interaction was modeled by considering electron energy transfer between neighboring atoms as an exponential function of its effective distance. In our mathematical representation we set the electron initially localized at the first site of the chain and we add the pumping of an acoustic wave at the zero site. We solved numerically the dynamic equations for the electron and lattice performing calculations for the spreading of the electronic wave-packet. Our results point out that the electron–phonon coupling and the acoustic wave pumping promotes a breakdown of the Anderson localization. We analyzed the dependence of latter with the degree of disorder and we found that at the range of strong disorder, the electronic transport mediated by the electron–lattice coupling is still present. Our calculations were done describing the lattice by using a simplified harmonic theory. In general, nonlinear vibrations also play interesting roles within the context of electronic dynamics mediated by lattice vibrations. Our calculations demonstrated that, even within the harmonic approximation, the coupling with an acoustic wave propagating along the lattice can promote the charge transport. We hope that those calculations stimulate further studies in the field of electronic transport mediated by acoustic wave pumping and electron–phonon coupling.

#### Acknowledgments

The research in Brazil was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES, INCT-Nano(Bio)Simes, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency).

#### References

- [1] F.M. Izrailiev, A.A. Krokhin, N.M. Makarov, Phys. Rep. 512 (2012) 125–254.
- [2] B. Santos, L.P. Viana, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, Solid State Commun. 138 (2006) 585.

- [3] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 673.
- [4] B. Kramer, A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56 (1993) 1469; T.A.L. Ziman, *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982) 337.
- [5] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* 109 (1958) 1492.
- [6] R.A. Romer, H. Schulz-Baldes, *Europhys. Lett.* 68 (2004) 247.
- [7] V.N. Kuzovkov, W. von Niessen, *Physica A* 377 (2007) 115.
- [8] F.A.B.F. de Moura, Iram Gléria, I.F. dos Santos, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 096401.
- [9] A.S. Pikovsky, D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 094101.
- [10] Ignacio Gracia-Mata, Dima L. Shepelyansky, *Phys. Rev. E* 79 (2009) 026205.
- [11] A. Iomin, *Phys. Rev. E* 81 (2010) 017601.
- [12] S. Tietsche, A. Pikovsky, *Europhys. Lett.* 84 (2008) 10006.
- [13] Y. Lahini, A. Avidal, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D.N. Christodoulides, Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 013906.
- [14] S.E. Skipetrov, R. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* 85 (2000) 736.
- [15] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman, M. Sergev, *Nature* 446 (2007) 53.
- [16] S. Flach, D.O. Krimer, Ch. Skokos, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 024101.
- [17] D. Abhishek, J.L. Lebowitz, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 134301.
- [18] W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 1698; W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger, *Phys. Rev. B* 22 (1980) 2099; A.J. Heeger, S. Kivelson, J.R. Schrieffer, W.-P. Su, *Rev. Mod. Phys.* 60 (1988) 781.
- [19] F.A.B.F. de Moura, R.A. Caetano, B. Santos, *J. Phys.: Condens. Matter* 24 (2012) 245401.
- [20] N.J. Zabusky, *Chaos* 15 (2005) 015102.
- [21] T. Dauxois, M. Peyrard, S. Ruffo, *Eur. J. Phys.* 26 (2005) S3–S11.
- [22] I. Brizhik, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, G. Ropke, M.G. Velarde, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 245105.
- [23] A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde, *Physica D* 240 (2011) 1954.
- [24] D. Hennig, M.G. Velarde, W. Ebeling, A.P. Chetverikov, *Phys. Rev. E* 78 (2008) 066606.
- [25] V.A. Makarov, M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, *Phys. Rev. E* 73 (2006) 066626.
- [26] D. Hennig, C. Neissner, M.G. Velarde, W. Ebeling, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 024306.
- [27] B.J. Alder, K.J. Runge, R.T. Scalettar, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 3022.
- [28] L.S. Brizhik, A.A. Eremko, *Physica D* 81 (1995) 295–304.
- [29] O.G. Cantu Ross, L. Cruzeiro, M.G. Velarde, W. Ebeling, *Eur. Phys. J. B* 80 (2011) 545–554.
- [30] M.G. Velarde, C. Neissner, *Int. J. Bifurc. Chaos* 18 (2008) 885–890.
- [31] A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde, *Eur. Phys. J. B* 80 (2011) 137–145.
- [32] M.G. Velarde, *J. Comput. Appl. Math.* 233 (2010) 1432.
- [33] M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Chetverikov, E.G. Ebeling, K.J. Wilson, *Donovan EPL* 168 (2014) 27004.
- [34] F.A.B.F. de Moura, *Physica D* 253 (2013) 66.
- [35] M.O. Sales, U.L. Fulco, M.L. Lyra, E.L. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, *J. Phys.: Condens. Matter* 27 (2015) 035104.
- [36] J.L.L. dos Santos, Ba Phi. Nguyen, F.A.B.F. de Moura, *Physica A* 435 (2015) 15–21.
- [37] J.M. Shilton, D.R. Mace, V.I. Talyanskii, Y. Galperin, M.Y. Simmons, M. Pepper, D. A. Ritchie, *J. Phys.: Condens. Matter* 8 (1996) L337–L343.
- [38] J.M. Shilton, V.I. Talyanskii, M. Pepper, D.A. Ritchie, J.E.F. Frost, C.J.B. Ford, C. G. Smith, G.A.C. Jones, *J. Phys. Condens. Matter* 8 (1996) L531.
- [39] R.P.G. McNeil, M. Kataoka, C.J.B. Ford, C.H.W. Barnes, D. Anderson, G.A.C. Jones, I. Farrer, D.A. Ritchie, *Nature* 477 (2011) 439–442.
- [40] C.H.W. Barnes, J.M. Shilton, A.M. Robinson, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 8410.
- [41] M.R. Astley, M. Kataoka, C.J.B. Ford, C.H.W. Barnes, D. Anderson, G.A.C. Jones, I. Farrer, D.A. Ritchie, M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 156802.
- [42] H. Sanada, T. Sogawa, H. Gotoh, K. Onomitsu, M. Kohda, J. Nitta, P.V. Santos, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 216602.
- [43] M.R. Astley, M. Kataoka, C.J.B. Ford, C.H.W. Barnes, D. Anderson, G.A.C. Jones, I. Farrer, D.A. Ritchie, M. Pepper, *Physica E* 40 (2008) 1136.
- [44] F.A.B.F. de Moura, *Int. J. Mech. Phys.* 22 (2011) 63.
- [45] M.O. Sales, S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, *J. Phys. Condens. Matter* 24 (2012) 495401.