

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

A equação de Schrödinger não linear com desordem  
determinística num campo elétrico\*

Leandro Junges

Trabalho de Conclusão de Curso  
Bacharelado em Física

Porto Alegre  
2007

---

\*Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Desenvolvimento</b>	<b>3</b>
2.1	Solução analítica: sistema sem interação . . . . .	3
2.2	Resolução via método numérico . . . . .	5
2.3	Análise dos dados obtidos . . . . .	7
2.4	Resultados . . . . .	9
2.4.1	Influência de $U$ e $\varepsilon$ na localização e no transporte . . . . .	9
2.4.2	Influência do campo elétrico dc externo . . . . .	12
2.4.3	Influência das condições iniciais na dinâmica do pacote . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Conclusão</b>	<b>20</b>

A equação de Schrödinger não linear com  
desordem determinística num campo elétrico

Leandro Junges (PIBIC-CNPq)

6 de dezembro de 2007

# Capítulo 1

## Introdução

Inúmeros fenômenos da natureza apresentam comportamento não-linear, tornando interessante o estudo destes sistemas. Dentre estes fenômenos podemos citar as excitações eletrônicas em superredes semicondutoras, os estados localizados intrínsecos em cristais fotônicos, a mobilidade, dobramento e folding produzidos por modos localizados intrínsecos transientes em moléculas biopoliméricas, entre outros. No presente trabalho, nos concentraremos apenas nas superredes semicondutoras, às quais adicionaremos um termo determinístico de desordem e um campo elétrico externo, a fim de enriquecer ainda mais nosso sistema.

Diante disso, nossa pesquisa tem como objetivo resolver numericamente, em uma rede unidimensional (finita, porém grande o suficiente para que a função de onda não chegue nas bordas nos tempos considerados), a equação de Schrödinger com desordem determinística (termo de Aubry-André), com um termo não linear de correlação (termo de Hubbard) e com o efeito de um campo elétrico externo de aplicado no sistema, para que possamos classificar localização e transporte em função da desordem, da correlação e do campo elétrico.

O sistema físico modelado consiste em uma rede discreta unidimensional formada por átomos que representam um sólido, onde cada um destes átomos possui um nível orbital que pode receber ou doar elétrons, e em nosso sistema, estes níveis tem valores de energia diferentes e aperiodicamente distribuídos em cada átomo, isto caracteriza as impurezas atômicas substitucionais ancoradas nos sítios da rede num semicondutor.

A dinâmica de um elétron numa rede é descrita pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \widehat{H} |\Psi\rangle, \quad (1.1)$$

$$|\Psi\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_j, \dots, \psi_N\rangle \quad (1.2)$$

onde  $|\Psi\rangle$  é a função de onda, descrita pelas suas amplitudes de Wannier em cada sítio ( $\psi_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ ) e  $\widehat{H}$  é o Hamiltoniano do sistema que, em nossa rede, é dado por

$$\begin{aligned} \widehat{H} = -V \sum_{n=1}^N (|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|) + \sum_{n=1}^N (F_n + \varepsilon_n) |n\rangle\langle n| + \\ + \sum_{n=1}^N U \langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle |n\rangle\langle n| \end{aligned} \quad (1.3)$$

Este Hamiltoniano possui dependência temporal implícita através de  $|\Psi\rangle = |\Psi(t)\rangle$ . Substituindo (1.3) na equação (1.1) obtemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = -V \sum_{n=1}^N (|n\rangle\langle n+1|\Psi\rangle + |n\rangle\langle n-1|\Psi\rangle) + \sum_{n=1}^N (F_n + \varepsilon_n)|n\rangle\langle n|\Psi\rangle + \sum_{n=1}^N U \langle\Psi|n\rangle\langle n|\Psi\rangle |n\rangle\langle n|\Psi\rangle \quad (1.4)$$

Considerando a notação  $\langle n|\Psi\rangle = \psi_n$ , chegamos a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = -V \sum_{n=1}^N (|n\rangle\psi_{n+1} + |n\rangle\psi_{n-1}) + \sum_{n=1}^N (F_n + \varepsilon_n)|n\rangle\psi_n + \sum_{n=1}^N U \psi_n^* \psi_n |n\rangle\psi_n \quad (1.5)$$

Para calcular o valor das componentes da função de onda, projeto a equação (1.5) nos sítios  $|j\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle j|\Psi\rangle = -V \sum_{n=1}^N (\langle j|n\rangle\psi_{n+1} + \langle j|n\rangle\psi_{n-1}) + \sum_{n=1}^N (F_n + \varepsilon_n)\langle j|n\rangle\psi_n + \sum_{n=1}^N U |\psi_n|^2 \langle j|n\rangle\psi_n \quad (1.6)$$

Sendo  $\langle j|\Psi\rangle = \psi_j$  e  $\langle j|n\rangle = \delta_{j,n}$  temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_j = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + (F_j + \varepsilon_j)\psi_j + U|\psi_j|^2\psi_j \quad (1.7)$$

Esta equação é não linear em  $\psi_j$ , isso faz com que o princípio de superposição não seja válido, porém, a norma  $|\psi_j|^2$  permanece constante na dinâmica do sistema, o que nos permite interpretá-la como uma densidade de probabilidade.

Em nosso sistema, os sítios representam o nível orbital atômico que pode receber ou doar elétrons de cada átomo da rede e a equação (1.7) fornece as amplitudes de Wannier da probabilidade de encontrar o elétron em cada sítio ( $\psi_j$ ). O termo  $\varepsilon_j\psi_j$ , chamado Aubry-André, onde  $\varepsilon_j = \varepsilon \cos(2\pi\gamma(j - j_0))$ , atribui o valor da energia do nível orbital em cada sítio, este valor é diferente para cada sítio já que este cosseno é incomensurável com a rede (a Razão Áurea

$$\gamma = \frac{(\sqrt{5} + 1)}{2} = 1.618033988749895... \quad (1.8)$$

é um número irracional), isso caracteriza a desordem determinística deste semicondutor, representando uma irregularidade dos níveis de energia na rede. O termo não linear  $U|\psi_j|^2\psi_j$  modela a interação do elétron com os fônons da rede no sítio  $j$ , e este termo representa a correlação. O termo  $F_j\psi_j$ , onde  $F_j = F(j - j_0)$ , sendo  $F = eEa$ , modela o campo elétrico externo dc de módulo  $E$  aplicado no sistema, que funciona como uma rampa de energia, favorecendo um sentido específico de deslocamento do elétron. Já o termo  $-V(\psi_{j-1} + \psi_{j+1})$  é responsável pela dinâmica eletrônica e representa o termo cinético com amplitude  $V$  (*hopping*) não nula de o elétron passar a sítios vizinhos, que é negativo devido ao potencial atrativo representado por ele. Todo este trabalho será realizado fixando as unidades de forma que  $V = 1$ , ou seja, podemos considerar que estamos normalizando o valor dos parâmetros da equação com relação ao módulo do *hopping*.

# Capítulo 2

## Desenvolvimento

### 2.1 Solução analítica: sistema sem interação

Iniciaremos o estudo da equação (1.7) no caso linear, sem desordem e sem campo elétrico externo, ou seja, quando  $U$ ,  $F$  e  $\varepsilon$  são iguais a zero. Neste caso a equação tem solução analítica, e se escreve em termos das funções de Bessel de primeira ordem, como veremos a seguir.

O problema nesta situação se resume em resolver a equação

$$i\hbar \frac{\partial \psi_j}{\partial t} = -V(\psi_{j-1} + \psi_{j+1}) \quad (2.1)$$

onde o hamiltoniano do sistema com  $N$  sítios pode ser expresso como

$$\widehat{H} = -V \sum_{j=1}^N (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) \quad (2.2)$$

sendo  $k$  o vetor de onda, temos

$$|k\rangle = \sum_{j=1}^N |j\rangle\langle j|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N |j\rangle e^{ijk a} \quad (2.3)$$

daí podemos ver que

$$\begin{aligned} \langle k'|\widehat{H}|k\rangle &= \langle k'|(-V) \sum_{j=1}^N (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|)|k\rangle \\ &= -V \sum_{j=1}^N \langle k'|(|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|)|k\rangle \\ &= -V \sum_{j=1}^N (\langle k'|j\rangle\langle j+1|k\rangle + \langle k'|j+1\rangle\langle j|k\rangle) \end{aligned} \quad (2.4)$$

O primeiro termo da soma interna ao somatório pode ser escrito como

$$\langle k'|j\rangle\langle j+1|k\rangle = \frac{1}{N} \sum_{j'=1}^N \sum_{j''=1}^N e^{-ij'k'a} \langle j'|j\rangle\langle j+1|j''\rangle e^{ij''ka}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_{j'=1}^N \sum_{j''=1}^N e^{i(j''k-j'k')a} \delta_{j,j'} \delta_{j+1,j''} \\
&= \frac{1}{N} e^{i((j+1)k-jk')a} = \frac{1}{N} e^{ika} e^{ij(k-k')a}
\end{aligned} \tag{2.5}$$

já o segundo termo da soma pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\langle k'|j+1\rangle \langle j|k\rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j'=1}^N \sum_{j''=1}^N e^{-ij'k'a} \langle j'|j+1\rangle \langle j|j''\rangle e^{ij''ka} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{j'=1}^N \sum_{j''=1}^N e^{i(j''k-j'k')a} \delta_{j',j+1} \delta_{j,j''} \\
&= \frac{1}{N} e^{i(jk-(j+1)k')a} = \frac{1}{N} e^{-ik'a} e^{ij(k-k')a}
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Substituindo os resultados obtidos em (2.5) e (2.6) na equação (2.4) temos

$$\begin{aligned}
\langle k'|\widehat{H}|k\rangle &= -V \sum_{j=1}^N \frac{1}{N} (e^{ika} e^{ij(k-k')a} + e^{-ik'a} e^{ij(k-k')a}) \\
&= -V (e^{ika} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{ij(k-k')a} + e^{-ik'a} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{ij(k-k')a}) \\
&= -V (e^{ika} \delta_{k,k'} + e^{-ik'a} \delta_{k,k'}) = -V \delta_{k,k'} (e^{ika} + e^{-ik'a})
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Sabemos que  $\widehat{H}|k'\rangle = E_{k'}|k'\rangle$ , portanto, multiplicando por  $|k\rangle$  pela esquerda temos

$$\widehat{H}|k'\rangle = E_{k'}|k'\rangle \rightarrow \langle k|\widehat{H}|k'\rangle = \langle k|E_{k'}|k'\rangle = E_{k'}\langle k|k'\rangle \tag{2.8}$$

somando em  $k'$  ambos os lados de (2.8) vemos que

$$\sum_{k'=1}^N \langle k|\widehat{H}|k'\rangle = \sum_{k'=1}^N E_{k'}\langle k|k'\rangle = \sum_{k'=1}^N E_{k'}\delta_{k,k'} = E_k \tag{2.9}$$

assim, usando a expressão obtida em (2.7), encontramos

$$\begin{aligned}
E_k &= \sum_{k'=1}^N \langle k|\widehat{H}|k'\rangle = \sum_{k'=1}^N \langle k'|\widehat{H}|k\rangle^* = \sum_{k'=1}^N [-V \delta_{k,k'} (e^{ika} + e^{-ik'a})]^* \\
&= \sum_{k'=1}^N -V (e^{-ika} + e^{ik'a}) \delta_{k,k'} = -V (e^{ika} + e^{-ika}) = -V (2 \cos ka)
\end{aligned} \tag{2.10}$$

finalmente obtemos

$$E_k = -2V \cos ka \tag{2.11}$$

Resolvamos agora a equação (1.1) por separação de variáveis

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\widehat{H}t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle = \sum_{k=1}^N |k\rangle \langle k| e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle \tag{2.12}$$

fazendo  $\langle j|\Psi(t)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \psi_j(t)$  chegamos a

$$\psi_j(t) = \sum_{k=1}^N \langle j|k\rangle \langle k| e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle \tag{2.13}$$

Para

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{-ikja} |k\rangle \quad (2.14)$$

temos

$$\begin{aligned} \psi_j(t) &= \sum_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'=1}^N e^{ik'ja} \langle k'|k\rangle \langle k|\Psi(0)\rangle e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \\ &= \sum_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikja} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \langle k|\Psi(0)\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{ikja} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j'=1}^N e^{-ikj'a} \langle j'|\Psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (2.15)$$

considerando a função de onda inicialmente distribuída como uma delta em  $j_0$ , ou seja,  $\langle j|\Psi(0)\rangle = \delta_{j,j_0}$ , temos

$$\begin{aligned} \psi_j(t) &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{ikja} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \sum_{j'=0}^N e^{-ikj'a} \delta_{j',j_0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{ikja} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} e^{-ikj_0 a} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{ik(j-j_0)a} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \end{aligned} \quad (2.16)$$

mas  $\sum_{k=1}^N \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk$  e  $L = Na$ . Assim, utilizando o resultado encontrado em (2.11), obtemos

$$\psi_j(t) = \frac{1}{N} \frac{Na}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{ik(j-j_0)a - i\frac{(-2V \cos ka)t}{\hbar}} dk \quad (2.17)$$

fazendo  $ka = x$  e  $j_0 = 0$ , chegamos finalmente a

$$\psi_j(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ixj} e^{-i\frac{2Vt}{\hbar} \cos x} dx = J_j \left( \frac{-2Vt}{\hbar} \right) e^{-ij\frac{\pi}{2}} \quad (2.18)$$

Como podemos ver, neste caso, a evolução temporal das amplitudes de Wannier pode ser escrita em termos de polinômios de Bessel.

## 2.2 Resolução via método numérico

A equação (1.7) não tem solução analítica quando  $U$ ,  $\varepsilon$  e/ou  $F$  são diferentes de zero, tornando necessário o uso de métodos numéricos para sua resolução.

O ponto de partida é resolver a equação (1.1), que na forma discretizada no espaço e no tempo é

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = \sum_{k=1}^N \widehat{H}_{jk}^n \psi_k^n \quad (2.19)$$

onde  $\psi_j^n = \psi(x_j, t_n)$  e  $\widehat{H}^n = \widehat{H}(\psi^n)$ , esta forma é chamada "explícita" no tempo. Na forma matricial temos

$$\Psi^{n+1} = \left( I - \frac{i\Delta t}{\hbar} \widehat{H}^n \right) \Psi^n \quad (2.20)$$

Existe ainda uma outra forma discretizada, chamada "implícita" no tempo, que é

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = \sum_{k=1}^N \widehat{H}_{jk}^{n+1} \psi_k^{n+1} \quad (2.21)$$

sendo  $\widehat{H}^{n+1} = \widehat{H}(\psi^{n+1})$ , e sua forma matricial é

$$\Psi^{n+1} = \left( I + \frac{i\Delta t}{\hbar} \widehat{H}^{n+1} \right)^{-1} \Psi^n \quad (2.22)$$

Ambos os métodos são equivalentes no limite  $\Delta t \rightarrow 0$  pois neste caso  $(1 + \varepsilon)^{-1} \approx (1 - \varepsilon)$  para  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Para uma maior precisão em nossos cálculos, utilizamos um terceiro método chamado Crank-Nicholson, retirado da referência [2], que consiste em uma combinação dos métodos implícito e explícito, mas considerando  $\widehat{H}^{n+1} = \widehat{H}^n$ , operação esta justificada pela equivalência entre ambas expressões no limite  $\Delta t \rightarrow 0$ . Em lugar de (2.19) ou (2.21), escrevemos

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \widehat{H}_{jk}^n (\psi_k^n + \psi_k^{n+1}) \quad (2.23)$$

cuja forma matricial é

$$\Psi^{n+1} = \Psi^n - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n (\Psi^n + \Psi^{n+1}) \quad (2.24)$$

ou

$$\left( I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right) \Psi^{n+1} = \left( I - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right) \Psi^n \quad (2.25)$$

cuja solução é

$$\Psi^{n+1} = \left( I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right)^{-1} \left( I - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right) \Psi^n \quad (2.26)$$

que representa um aproximante de Padé da exponencial complexa

$$e^{-z} \approx \frac{1 - \frac{z}{2}}{1 + \frac{z}{2}} \quad (2.27)$$

Podemos ver que esta operação é unitária, o que é muito importante no nosso cálculo pois queremos evoluir no tempo conservando a norma constante e igual a um.

Para o caso de uma matriz tridiagonal, que é nosso caso, podemos evitar calcular a inversa de uma matriz, como é apresentado na equação (2.26). Podemos fazer isto reordenando os termos da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \Psi^{n+1} &= \left( I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right)^{-1} \left[ 2I - \left( I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right) \right] \Psi^n \\ &= \left[ 2 \left( I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right)^{-1} - I \right] \Psi^n \\ &= (Q^{-1} - I) \Psi^n \\ &= Q^{-1} \Psi^n - \Psi^n \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde  $Q = \frac{1}{2} \left[ I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \widehat{H}^n \right]$ . Para evitar inverter uma matriz  $N \times N$ , sendo  $N$  o tamanho de nossa cadeia unidimensional, resolvemos o sistema

$$Q\chi = \Psi^n \quad (2.29)$$

e fazemos nosso sistema evoluir no tempo segundo a regra

$$\Psi^{n+1} = \chi - \Psi^n \quad (2.30)$$

Como nossa matriz é tridiagonal (e complexa) podemos usar um método de eliminação de Gauss, chamado algoritmo de Thomas, que consiste em resolver o sistema  $Ax = b$  da seguinte forma: Guardamos a matriz  $A$  tridiagonal de maneira compacta

$$A_c = \begin{bmatrix} ? & \beta_1 & \gamma_1 \\ \alpha_1 & \beta_2 & \gamma_2 \\ \alpha_2 & \beta_3 & \gamma_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_{N-1} & \beta_N & ? \end{bmatrix}$$

A eliminação forward requer apenas a modificação dos termos da diagonal

$$\beta'_i = \beta_i - \frac{\alpha_{i-1}}{\beta'_{i-1}} \gamma_{i-1} \quad i = 2, 3, \dots, N \quad (2.31)$$

com  $\beta'_1 = \beta_1$ . Os elementos de  $b$  são

$$b'_i = b_i - \frac{\alpha_{i-1}}{\beta'_{i-1}} b'_{i-1} \quad i = 2, 3, \dots, N \quad (2.32)$$

com  $b'_1 = b_1$ . Para a substituição backward o vetor  $x$  é obtido facilmente de  $x_N = b_N/\beta'_N$  e da recursão downward

$$x_i = \frac{b'_i - \gamma_i x_{i+1}}{\beta'_i} \quad i = N-1, N-2, \dots, 1 \quad (2.33)$$

Assim, teremos uma matriz, não apenas tridiagonal, mas simétrica, o que nos permite guardar apenas uma matriz  $N \times 2$  do tipo

$$A_c = \begin{bmatrix} ? & \beta_1 \\ \alpha_1 & \beta_2 \\ \alpha_2 & \beta_3 \\ \vdots & \vdots \\ \alpha_N & \beta_N \end{bmatrix}$$

onde todos os  $\alpha$ 's são iguais ao *hopping*, portanto, os  $\beta$ 's, que contêm as ocupações por sítio, são os únicos termos a serem atualizados. Este método foi implementado com o auxílio da subrotina *tcge.f* escrita em linguagem Fortran retirada da referência [1].

O programa implementado para resolver a equação (1.7), chamado *lchinatown.f*, foi escrito em linguagem Fortran, compilado por um compilador Ifort e rodado em um processador Intel Pentium 4, no Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS).

## 2.3 Análise dos dados obtidos

O programa *lchintown.f*, citado anteriormente, calcula o valor da probabilidade de encontrar a partícula em cada sítio ( $|\psi_j|^2$ ), gerando um arquivo de saída com três colunas de dados: o tempo (em unidade parametrizada  $\tau = Vt/\hbar$ ), o sítio (são plotados o sítio central  $l$  e seus 500 vizinhos de cada lado), e o valor de  $|\psi_j|^2$  (amplitude de probabilidade), as informações deste arquivo são analisadas em um gráfico tridimensional, gerado pelo programa Gnuplot, que mostra a evolução temporal da densidade de probabilidade de encontrar a partícula em cada sítio da rede (ver figura 2.1).

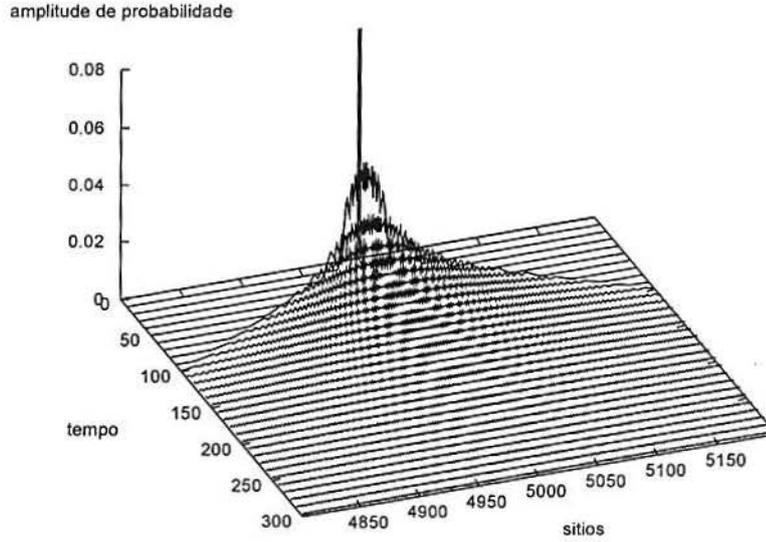


Figura 2.1: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 3.4$

Além dos gráficos espectrais da evolução temporal da função de onda, o programa ainda calcula os seguintes parâmetros:

$$anderson = |\psi_l|^2 \quad (2.34)$$

que é chamado parâmetro de Anderson para localização e dá o valor da ocupação no sítio central ( $l$ ) da rede;

$$wegner = \left[ \sum_{i=1}^N |\psi_i|^4 \right]^{-1} \quad (2.35)$$

chamado termo de participação de Wegner;

$$shannon = - \sum_{i=1}^N |\psi_i|^2 \ln |\psi_i|^2 \quad (2.36)$$

conhecido como entropia de Shannon;

$$centroide = \sum_{i=1}^N |\psi_i|^2 (i - l) \quad (2.37)$$

chamada função centroide, que fornece a distância média da ocupação em relação ao sítio central ( $l$ ).

Todos estes parâmetros são plotados em função do tempo ( $\tau$ ) a fim de melhorar a caracterização da evolução temporal da densidade de probabilidade de encontrar a partícula na rede. A análise do sistema é feita, primeiramente, variando-se os parâmetros  $U$ ,  $F$  e  $\varepsilon$  e observando a evolução temporal da função de onda e de todos os parâmetros calculados.

## 2.4 Resultados

### 2.4.1 Influência de $U$ e $\varepsilon$ na localização e no transporte

O objetivo principal deste trabalho é classificar o transporte e a localização eletrônica da forma mais geral possível. Um método antigo utilizado com esta finalidade é considerar o seguinte comportamento da função de onda:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\psi_l^t|^2 = 0 \quad (2.38)$$

onde  $|\psi_l|^2$  é a amplitude da probabilidade de encontrar a partícula no sítio onde foi lançada em  $t = 0$  ( $l$ ). Sob a luz deste critério, para um determinado conjunto de parâmetros que satisfaz a condição (2.38), considera-se a função de onda deslocalizada (extendida), do contrário, a função é considerada localizada. Este critério é estudado verificando-se o comportamento do parâmetro de Anderson para a localização (2.34).

Considerando o critério citado e utilizando como configuração inicial em nosso sistema toda a função de onda localizada no sítio central  $l$ , como uma delta, obtemos, fixando os parâmetros  $F = 0$  e  $\varepsilon = 0$ , estados localizados para os valores de  $U$  maiores do que, aproximadamente, 3.45 (ver figura 2.2).

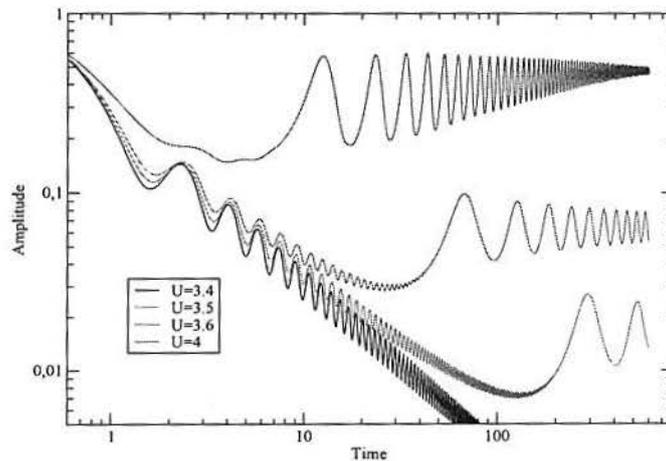


Figura 2.2: Critério de Anderson para  $\varepsilon = 0$

O critério (2.38) não se mostrou tão preciso e apresentou informações pouco conclusivas quando fixamos os parâmetros  $F = 0$  e  $U = 0$  (e mantemos a condição inicial na forma de uma delta), variando  $\varepsilon$ , pois os gráficos da sua evolução temporal se apresentaram extremamente ruidosos e com convergência demasiadamente lenta e inconclusiva. Tendo em vista este fato, partimos para a análise das outras funções calculadas pelo programa, citadas anteriormente.

Das funções estudadas, aquelas que forneceram informações mais importantes sobre a dinâmica do pacote de ondas foram a entropia de Shannon (2.36) e a função de participação de Wegner (2.35). Analisando estas funções, ainda considerando nossa condição inicial como uma delta, vemos que o valor de (2.36) e (2.35) em  $t = 0$  são 0 e 1 respectivamente, e ao evoluirmos estas funções no tempo, podemos perceber, apenas olhando para as equações que representam estas funções, que em ambos os casos teremos um aumento no valor da função para a deslocalização da partícula e uma redução no caso contrário. As figuras 2.3 e 2.4 corroboram a conclusão apresentada por (2.38), indicando um início de localização do pacote para valores de  $U$  entre 3.4 e 3.5.

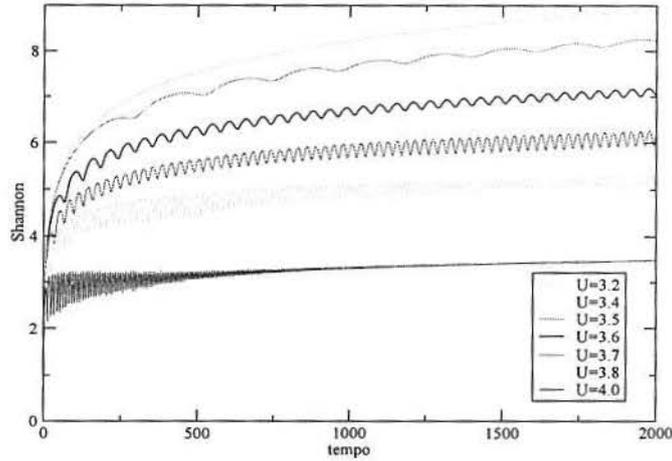


Figura 2.3: Entropia de Shannon para  $F = 0$  e  $\varepsilon = 0$

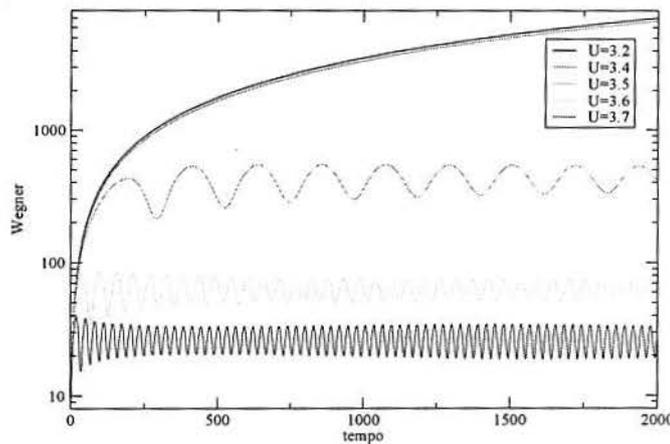


Figura 2.4: Função de participação de Wegner para  $F = 0$  e  $\varepsilon = 0$

Uma vantagem interessante apresentada pela entropia de Shannon e pela função de participação de Wegner com relação ao critério (2.38), é a maior qualidade e clareza dos gráficos no caso desordenado, ou seja, para  $F = 0$ ,  $U = 0$  e  $\varepsilon \neq 0$ . Nesta situação, observando as figuras 2.5 e 2.6, podemos ver que a localização da partícula ocorre, aproximadamente, para valores de  $\varepsilon$  maiores que 2.0 .

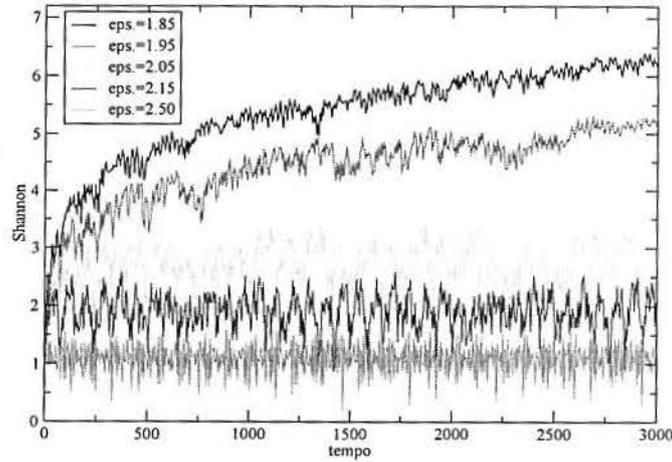


Figura 2.5: Entropia de Shannon para  $F = 0$  e  $U = 0$ , variando-se os valores de  $\varepsilon$  (eps.)

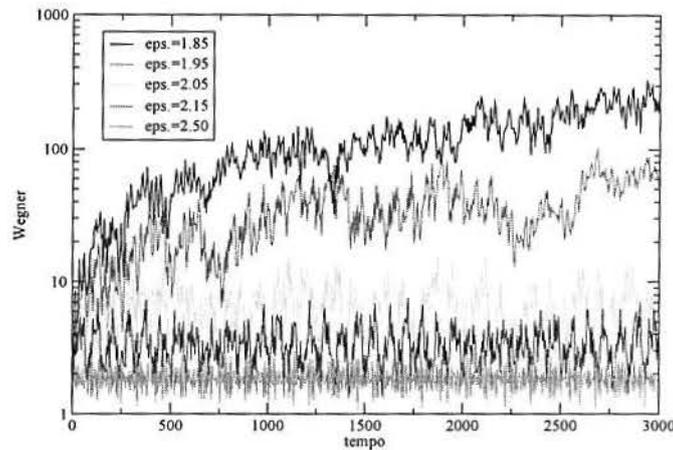


Figura 2.6: Função de Participação de Wegner para  $F = 0$  e  $U = 0$ , variando-se os valores de  $\varepsilon$  (eps.)

Considerando a condição inicial como uma delta no sítio central da rede, para os casos em que mantemos um valor fixo do parâmetro  $U$  ( $U = a$ ) e incrementamos o valor de  $\varepsilon$  a partir de zero, podemos perceber que a dinâmica do pacote de ondas evolui de forma a manter a estrutura do caso onde  $U = a$  e  $\varepsilon = 0$ , porém, com o pacote ficando cada vez mais localizado com o aumento de  $\varepsilon$ , até atingir um valor limite para este parâmetro, onde praticamente toda função de onda está localizada no sítio de origem. No caso contrário, onde escolhemos um valor fixo de  $\varepsilon$  ( $\varepsilon = a$ ), e incrementamos o valor de  $U$ , observamos, qualitativamente, o mesmo

efeito anteriormente citado, ou seja, percebemos a evolução de forma a manter uma estrutura parecida com a dinâmica de  $\varepsilon = a$  e  $U = 0$ , porém, com uma tendência de localização com o aumento de  $U$  até que se atinja um limiar onde toda a função permanece localizada no sítio de origem.

## 2.4.2 Influência do campo elétrico dc externo

O efeito da aplicação de um campo elétrico dc externo a um sistema quântico com potencial periódico já é conhecido, são as chamadas *oscilações de Bloch*. Contudo, existem poucas referências relacionadas aos detalhes da dinâmica destas oscilações, tendo ainda trabalhos bastante básicos e recentes sendo publicados com o intuito de explicar teoricamente este efeito (ver [5]). Nosso trabalho tem como objetivo mostrar os efeitos da aplicação deste campo elétrico na dinâmica do sistema, associado aos efeitos da não linearidade e da desordem.

Primeiramente, consideramos a condição inicial do pacote de ondas como uma delta no sítio de origem ( $l$ ), e analisamos o caso sem desordem e sem não linearidade, ou seja, com os parâmetros  $U = 0$  e  $\varepsilon = 0$ . Pudemos observar, neste caso, que o sistema apresenta uma oscilação simétrica em torno do sítio de origem, com período correspondente ao período conhecido para as oscilações de Bloch

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{aF} \quad (2.39)$$

Considerando que o nosso tempo parametrizado é dado por

$$\tau = \frac{Vt}{\hbar} \quad (2.40)$$

com  $V = 1$ , e usando este valor em (2.39) obtemos,

$$\tau_B \hbar = \frac{2\pi\hbar}{aF} \quad (2.41)$$

$$\tau_B = \frac{2\pi}{aF} \quad (2.42)$$

para o parâmetro do campo  $F = 0.02$ , e levando em consideração que nosso parâmetro de rede é  $a = 1$ , encontramos

$$\tau_B = \frac{2\pi}{0.02} \quad (2.43)$$

$$\tau_B = 100\pi \quad (2.44)$$

valor este que está em concordância com o período observado na figura 2.7.

No caso onde temos os efeitos do campo elétrico e da não linearidade conjuntamente, observamos que a oscilação mantém a sua forma, porém não é mais simétrica, pois a função de onda tende a se concentrar mais em um lado do sítio central, como pode ser visto na figura 2.9. A assimetria deste sistema fica mais evidente ao analisarmos o gráfico da função centróide (figura 2.37), na figura 2.10. Note que, quanto mais positivo se torna o valor desta função, maior é a densidade de probabilidade ( $|\psi_i|^2$ ) para os valores  $i > l$  (e vice versa), ou seja, a densidade de probabilidade tem maior valor nos sítios com  $i > l$ .

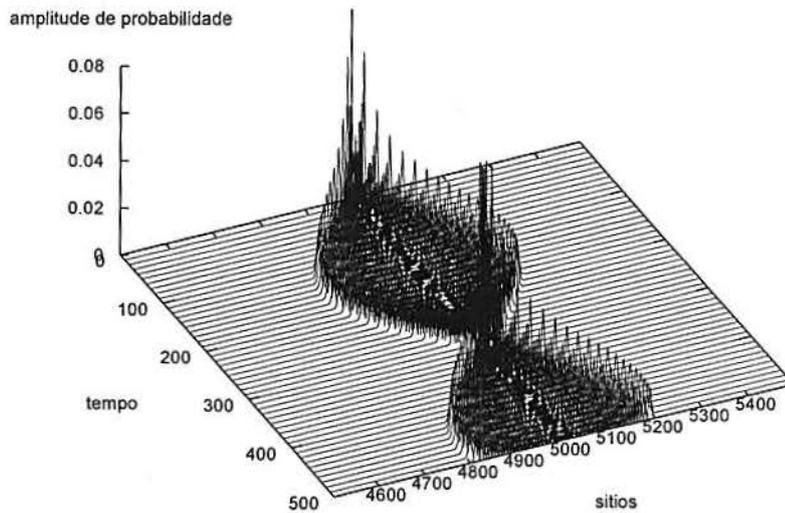


Figura 2.7: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 0$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

Para um determinado valor fixo de  $F$ , ao incrementarmos o módulo da não linearidade  $U$  desde zero, a função de onda se concentra cada vez mais em um lado da oscilação, até que se atinja um limiar onde o pacote começa a se localizar e, a partir daí, praticamente toda a função de onda permanece localizada no sítio central. Esse efeito é mostrado nas figuras 2.7, 2.8, 2.9, 2.11 e 2.12.

Para os casos onde mantemos  $F$  fixo e aumentamos o valor de  $\varepsilon$  desde zero, podemos perceber que o sistema tende a permanecer cada vez mais localizado no sítio central, além disso, o pacote de ondas apresenta uma espécie de ruído, caracterizando a desordem aperiódica modelada no sistema. O efeito concomitante da desordem e do campo pode ser visto nas figuras 2.13, 2.14 e 2.15.

### 2.4.3 Influência das condições iniciais na dinâmica do pacote

É intuitivo imaginar que a forma da distribuição do pacote de ondas no tempo inicial tenha influência na dinâmica do pacote, porém, mais do que isso, observamos que as condições iniciais podem inclusive determinar se o sistema é localizado ou estendido, para um mesmo conjunto de parâmetros dado.

Todas as informações mostradas até agora foram obtidas considerando a condição inicial como uma distribuição em forma de delta no sítio central, condição esta utilizada pela maioria dos artigos que trabalham em sistemas semelhantes ao nosso (ver [3] - [4]). Porém, analisando outras condições iniciais, pudemos perceber que estas tem influência direta na forma com que a não linearidade e a desordem contribuem no transporte da partícula.

Analisando a figura 2.16, que tem os parâmetros  $F = 0$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 5$ , e tem como distribuição inicial uma delta no sítio central ( $l$ ), vemos que, a menos de

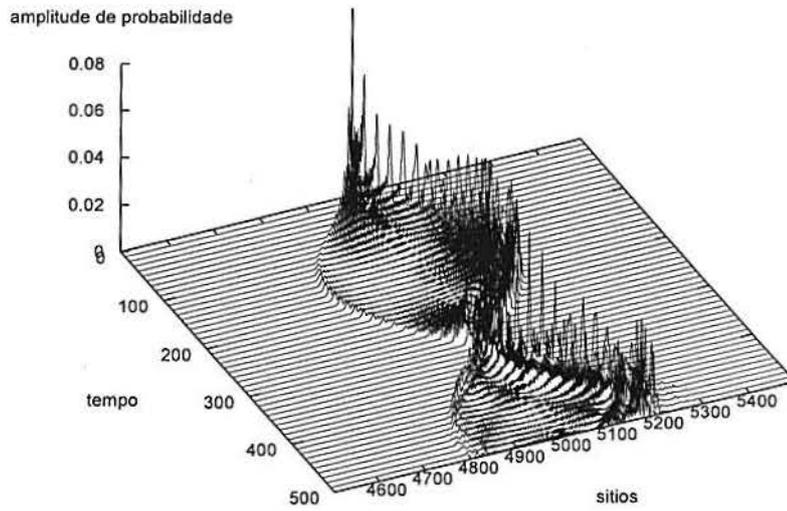


Figura 2.8: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 2.5$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

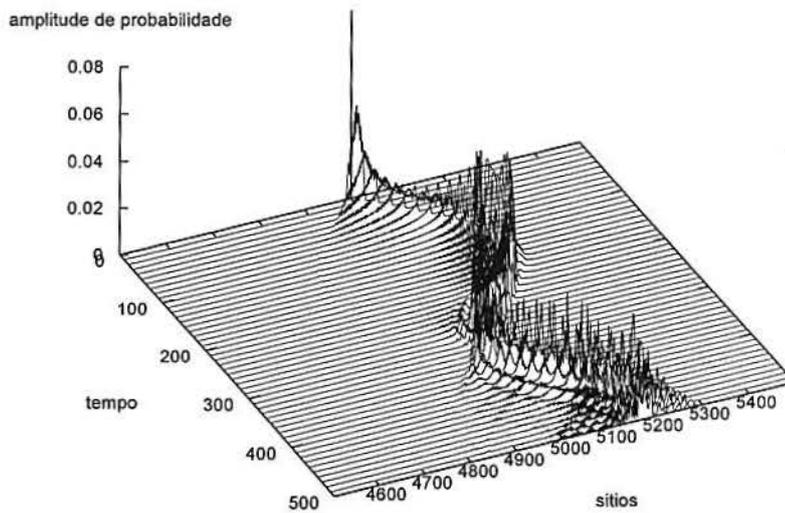


Figura 2.9: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 3.5$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

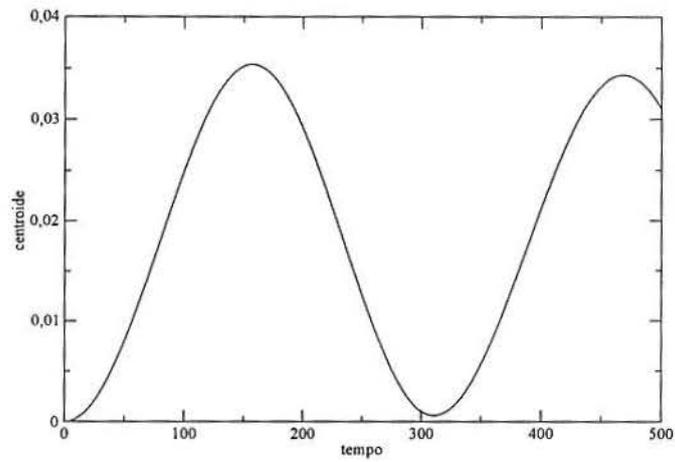


Figura 2.10: Gráfico da função centróide, calculada com os parâmetros  $F = 0.02$  ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 3.5$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

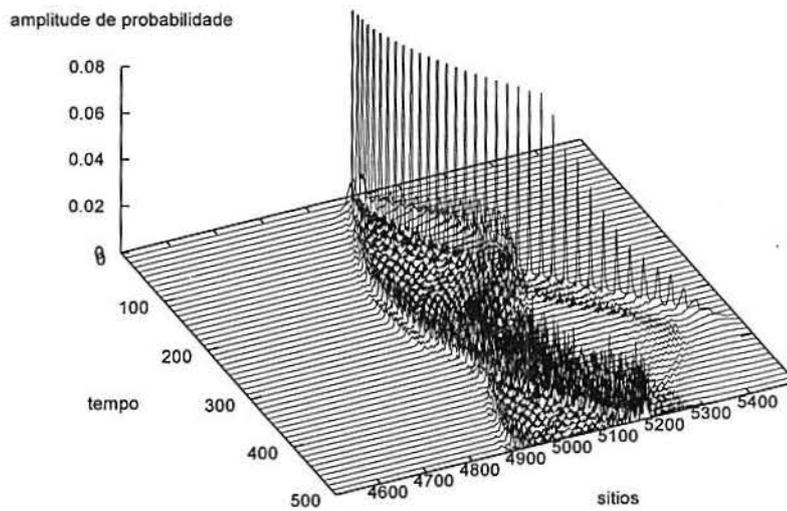


Figura 2.11: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$  ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 4$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

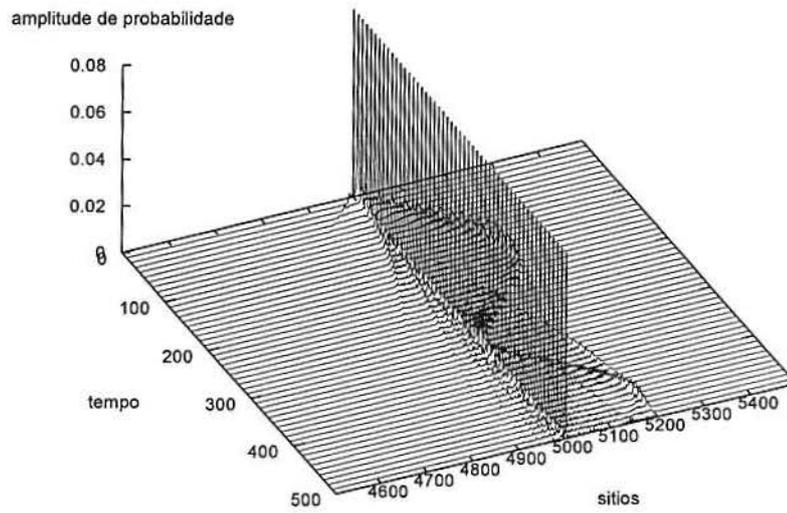


Figura 2.12: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 4.5$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

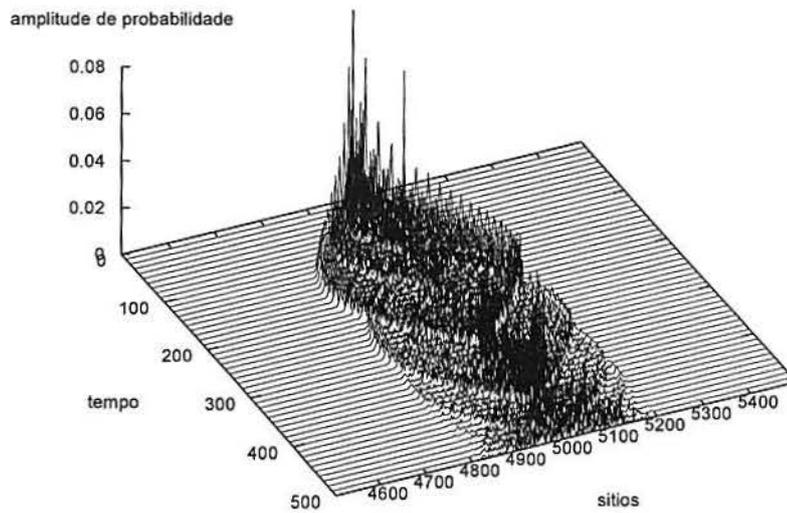


Figura 2.13: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0.1$  e  $U = 0$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

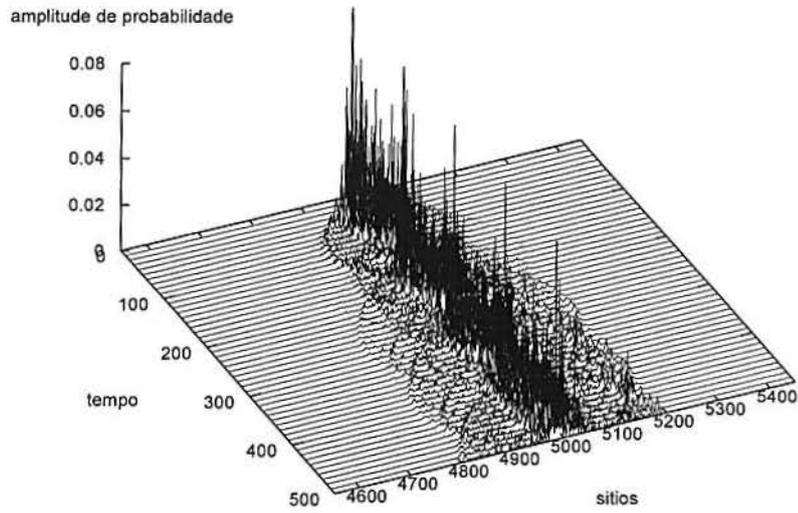


Figura 2.14: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0.3$  e  $U = 0$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

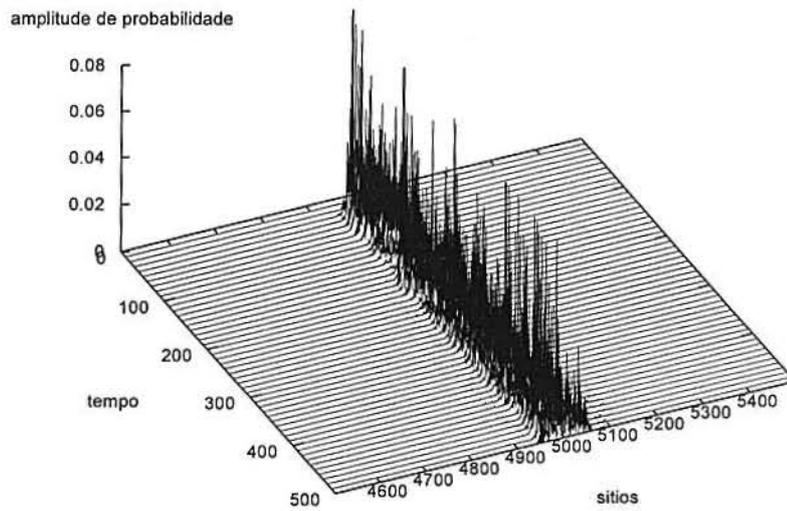


Figura 2.15: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0.02$ ,  $\varepsilon = 0.5$  e  $U = 0$ , para uma distribuição como uma delta no sítio central ( $l$ )

pequenos pacotes de ondas que escapam no tempo inicial, a função de onda permanece bastante localizada no sítio de origem. Já no caso representado pela figura 2.17, que tem os mesmos parâmetros do caso anterior, mas com uma distribuição inicial em forma de uma gaussiana centrada no sítio central ( $l$ ) e com desvio padrão  $\sigma = 5$ , vemos claramente que a função de onda se deslocaliza na evolução temporal do sistema.

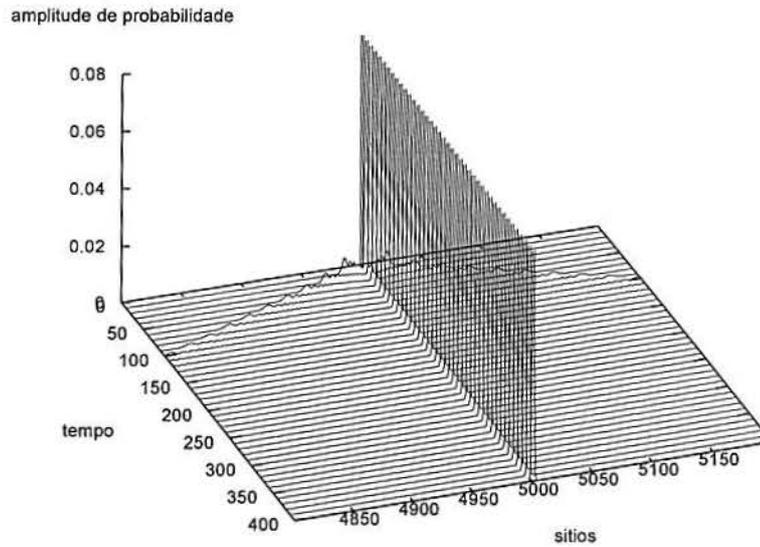


Figura 2.16: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0$ ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 5$ , para uma distribuição inicial como uma delta no sítio central ( $l$ )

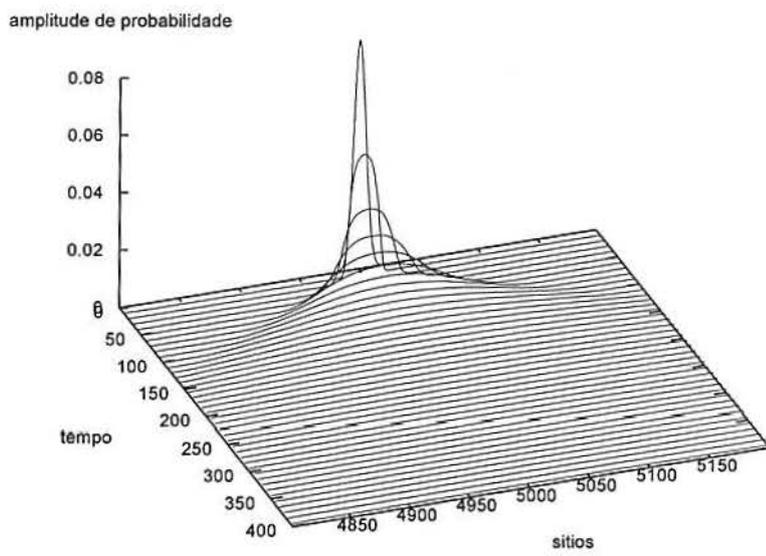


Figura 2.17: Evolução temporal do pacote para os parâmetros  $F = 0$  ,  $\varepsilon = 0$  e  $U = 5$ , para uma distribuição gaussiana em torno do sítio central ( $l$ ), com desvio padrão  $\sigma = 5$

# Capítulo 3

## Conclusão

No estudo da equação de Schrödinger não linear com desordem determinística num campo elétrico, pudemos perceber diversas características interessantes da dinâmica do sistema.

Inicialmente, considerando o sistema sem desordem e sem campo, vimos que a não linearidade atua de forma a induzir localização, sendo que há um limiar, situado em  $U \approx 3.5$ , onde praticamente toda a função de onda permanece no sítio de origem. Já para o caso em que o sistema é linear e sem campo, constatamos que a desordem também tende a localizar a partícula, com um limiar de localização dado por  $\varepsilon \approx 2.0$ . A forma com que a função de onda se localiza se dá de forma diferente nos dois casos, mas o efeito final é o mesmo. Vimos também que a desordem atua de forma mais incisiva na localização do pacote se comparada com a correlação.

Ao aplicarmos um campo elétrico externo, observamos a aparição das chamadas *oscilações de Bloch*, que restringem o pacote em uma dada região da rede. Estas oscilações tem período que, em termos de parâmetros, dependem unicamente do inverso do módulo do campo elétrico. Na combinação dos efeitos do campo com a não linearidade e a desordem, vimos que, com o incremento de ambas, as oscilações de Bloch se deformam, levando o sistema a um estado cada vez mais localizado.

Outro fator que mostrou-se extremamente importante para a caracterização do transporte na rede, foi a forte influência das condições iniciais na dinâmica do pacote. Em nosso estudo, comparamos dois tipos de distribuição inicial: uma delta no sítio central da rede ( $l$ ), e uma gaussiana centrada em  $l$  e com desvio padrão  $\sigma = 5$ . Fixando o conjunto de parâmetros da equação (1.7), os dois casos citados mostraram grande dissemelhança na evolução temporal do pacote, inclusive, para certos parâmetros, determinando se o sistema era localizado ou estendido.

# Referências Bibliográficas

- [1] William H. Press et. al., Numerical recipes in Fortran 77: the art of scientific computing, Cambridge University Press, second edition, volume 1 (2001).
- [2] Alejandro Garcia, Numerical Methods for Physics, second edition, Prentice Hall do Brasil, Rio de Janeiro, (2000)
- [3] Magnus Johansson et. al., Phys. Rev. B, **52** 231 (1995)
- [4] H. N. Nazareno, P. E. de Brito, and E. S. Rodrigues, Phys. Rev. B **68** 054204 (2003)
- [5] T. Hartmann et. al., New Journal of Physics **6** 2 (2004)