

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO

**A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NÃO LINEAR  
DISCRETA COM DESORDEM DE AUBRY-ANDRÉ  
E COM CAMPO ELÉTRICO DC\***

Leandro Junges

Dissertação realizada sob a orientação do Professor Dr. Gerardo Guido Martínez Pino e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

2009

---

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



# Agradecimentos

Durante o período em que estive realizando este trabalho de pesquisa científica, muitas pessoas me acompanharam nesta jornada e muitas instituições me deram apoio. Enorme foi a ajuda que recebi, tanto direta quanto indiretamente, de forma que quero agradecer especialmente os citados abaixo:

- o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo financiamento deste trabalho;
- a Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pelo ensino gratuito e de qualidade e pela estrutura disponibilizada;
- o professor Gerardo Guido Martinez Pino, pela dedicação e paciência na orientação deste trabalho;
- o bolsista de iniciação científica Artur Malabarba, pela idéia de alguns diagramas apresentados;
- minha família, especialmente meus pais João Augusto e Stella e minha irmã Lisiane, pelo apoio incondicional e pela base forte que sempre me proporcionaram;
- minha namorada Gabriela, pelo amor, carinho e dedicação;
- todos os meus amigos, pelo companheirismo desde os tempos de graduação.

Muito Obrigado a todos.



# Sumário

<b>1. Introdução e motivação</b> . . . . .	1
1.1 A equação de Schrödinger não linear . . . . .	3
1.2 Desordem aperiódica e campo elétrico . . . . .	8
<b>2. A equação de Schrödinger não linear</b> . . . . .	11
2.1 Caso de bósons interagentes . . . . .	11
2.2 Conservação da norma . . . . .	13
2.3 Limite tight-binding unidimensional . . . . .	15
2.4 Solução analítica para o caso não interagente . . . . .	17
<b>3. Campo elétrico e oscilações de Bloch</b> . . . . .	23
3.1 Descrição via modelo tight-binding . . . . .	24
3.2 Dependência das condições iniciais . . . . .	26
3.3 Valores esperados de posição . . . . .	29
<b>4. Desordem</b> . . . . .	35
4.1 Localização em sistemas eletrônicos desordenados . . . . .	35
4.2 Modelo de Anderson . . . . .	40
4.3 Modelo de Aubry-André . . . . .	41
<b>5. Análise Numérica</b> . . . . .	43
5.1 Método de Crank-Nicholson . . . . .	43
5.2 Localização dinâmica . . . . .	46
5.3 Resultados numéricos . . . . .	48
5.3.1 Correlação . . . . .	50
5.3.2 Desordem . . . . .	54
5.3.3 Campo elétrico . . . . .	57

---

5.3.4	Correlação e desordem . . . . .	61
5.3.5	Correlação e campo elétrico . . . . .	64
5.3.6	Desordem e campo elétrico . . . . .	68
5.3.7	Correlação, desordem e campo elétrico . . . . .	72
<b>6.</b>	<b>Análise geral e conclusões . . . . .</b>	<b>79</b>
<b>A.</b>	<b>Figuras da evolução temporal da densidade de probabilidade . . . . .</b>	<b>85</b>
A.1	Correlação . . . . .	85
A.2	Desordem . . . . .	89
A.3	Campo elétrico . . . . .	93
A.4	Correlação e campo elétrico . . . . .	96
A.5	Desordem e campo elétrico . . . . .	99
	<b>Referências Bibliográficas . . . . .</b>	<b>i</b>

# Lista de Figuras

1.1	<b>Figura da esquerda:</b> Ilustração do aparato experimental que representa o conjunto linear de guias de onda. A intensidade do campo elétrico em cada guia é representada em vermelho. <b>Figura da direita:</b> Visão frontal da saída do conjunto de guias de ondas, considerando diferentes valores para a potência de entrada $P$ . Perceba que o aumento da potência gera localização das amplitudes do campo em torno da guia de onda central (figura retirada da referência [6]). . . . .	6
2.1	Evolução temporal de $ \psi_j(t) ^2$ , dada pela equação (2.56). . . . .	20
2.2	Evolução temporal de $ \psi_j(t) ^2$ , dada pela equação (2.62) com $\sigma = 5$ e $a = 1$ . . . . .	21
3.1	Representação esquemática do potencial numa cadeia de íons (potencial periódico), modificado por um campo elétrico de externo, que induz o aparecimento de uma "rampa", desnivelando os potenciais dos íons. . . . .	24
3.2	Evolução temporal de $ \psi_j(t) ^2$ , dada pela equação (3.23), para $\gamma = 40$ . Observa-se uma oscilação de Bloch com período $T_B$ . . . . .	28
3.3	Evolução temporal de $ \psi_j(t) ^2$ , dada pela equação (3.27), para $\gamma = 40$ e $a^2/\sigma^2 = 0.04$ . Neste caso, o centróide do pacote de ondas realiza uma oscilação de Bloch, de acordo com (3.29). . . . .	29
4.1	(a) Representação esquemática de um potencial periódico unidimensional $V(x)$ , onde se encontra uma partícula com energia $E$ . (b) Representação do módulo quadrado da função de onda da partícula neste potencial. . . . .	36
4.2	(a) Representação esquemática de um potencial aperiódico unidimensional $V(x)$ , onde se encontra uma partícula com energia $E$ . (b) Representação da localização da função de onda da partícula neste potencial. . . . .	37

5.1	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = F = 0$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	49
5.2	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = F = 0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	50
5.3	Evolução temporal da função de Anderson (5.18) para $\varepsilon = F = 0$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Observe que há um limiar de localização entre $U = 3.4$ e $U = 3.5$ , onde a função de onda localiza. . . . .	51
5.4	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $\varepsilon = F = 0$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Observe que, para valores de $U \leq 3.4$ , as curvas se superpõem. . . . .	51
5.5	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $\varepsilon = F = 0$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	52
5.6	Valor do prefator multiplicativo $m$ (5.31) em função de $U$ . Perceba que em torno do limiar $U \approx 3.45$ a curva apresenta uma modificação na sua curvatura. . . . .	53
5.7	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $\varepsilon = F = 0$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	53
5.8	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $\varepsilon = F = 0$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	54
5.9	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $U = F = 0$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps), considerando a distribuição inicial delta. Note que abre-se um gap em torno de $\varepsilon = 2$ . . . . .	55
5.10	Evolução temporal da função e participação de Wegner (5.20) para $U = F = 0$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps), considerando a distribuição inicial delta. . . . .	55
5.11	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $U = F = 0$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps), considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	56
5.12	Evolução temporal da função e participação de Wegner (5.20) para $U = F = 0$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps), considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	56
5.13	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	57
5.14	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $U = \varepsilon = 0$ e diferentes valores de $F$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	58

5.15	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $U = \varepsilon = 0$ e diferentes valores de $F$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	58
5.16	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	59
5.17	Evolução temporal da função centroide (5.21) para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e diferentes valores de $F$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	60
5.18	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $U = \varepsilon = 0$ e diferentes valores de $F$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . Perceba que a largura da distribuição gaussiana apresenta uma oscilação com período $T_B/2$ , com os mínimos pares e ímpares levemente diferentes (observe o caso $F = 0.01$ ). . . . .	60
5.19	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $U = \varepsilon = 0$ e diferentes valores de $F$ , considerando a distribuição inicial gaussiana. Perceba que a largura da distribuição gaussiana apresenta uma oscilação com período $T_B/2$ , com os mínimos pares e ímpares levemente diferentes (observe o caso $F = 0.01$ ). . . . .	61
5.20	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ para distribuição inicial delta, com o valor médio da função de Anderson entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	62
5.21	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	63
5.22	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ para distribuição inicial gaussiana ( $\sigma = 5$ ), com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	63
5.23	Evolução temporal da função centróide (5.21) para $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Note que o pacote localiza para $U = 5$ . . . . .	64
5.24	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Note que o pacote localiza para $U = 5$ . . . . .	65
5.25	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Note que o pacote localiza para $U = 5$ ( $W(t) \approx 0$ neste caso). . . . .	65

5.26	Diagrama $F \times U$ para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	66
5.27	Diagrama $F \times U$ para distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	67
5.28	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	67
5.29	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	68
5.30	Evolução temporal da função centróide (5.21) para $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e diferentes valores de $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	68
5.31	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $U = 0$ , $F = 0.02$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps.), considerando a distribuição inicial delta. . . . .	69
5.32	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $U = 0$ , $F = 0.02$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps.), considerando a distribuição inicial delta. . . . .	70
5.33	Evolução temporal da função centróide (5.21) para $U = 0$ , $F = 0.02$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps.), considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	71
5.34	Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para $U = 0$ , $F = 0.02$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps.), considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	71
5.35	Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para $U = 0$ , $F = 0.02$ e diferentes valores de $\varepsilon$ (eps.), considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	72
5.36	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.02$ , para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	73
5.37	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.05$ , para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	74
5.38	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.1$ para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ . . . . .	74

5.39	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.2$ para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ .	75
5.40	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.02$ , para distribuição inicial gaussiana de $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ .	76
5.41	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.05$ , para distribuição inicial gaussiana de $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ .	76
5.42	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.1$ para distribuição inicial gaussiana de $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ .	77
5.43	Diagrama $U \times \varepsilon(\text{eps.})$ considerando $F = 0.2$ para distribuição inicial gaussiana de $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre $t = 2180$ e $t = 2200$ .	77
A.1	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 3.2$ , considerando a distribuição inicial delta.	85
A.2	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 3.4$ , considerando a distribuição inicial delta.	86
A.3	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 3.5$ , considerando a distribuição inicial delta.	86
A.4	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 3.6$ , considerando a distribuição inicial delta.	87
A.5	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 5.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ .	87
A.6	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 10.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ .	88
A.7	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = F = 0$ e $U = 20.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ .	88
A.8	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 1.85$ , considerando a distribuição inicial delta.	89

A.9	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 1.95$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	89
A.10	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 2.05$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	90
A.11	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 2.15$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	90
A.12	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 1.85$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	91
A.13	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 1.95$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	91
A.14	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 2.05$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	92
A.15	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = F = 0$ e $\varepsilon = 2.15$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	92
A.16	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.02$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	93
A.17	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	93
A.18	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.1$ , considerando a distribuição inicial delta. . . . .	94
A.19	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.02$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	94
A.20	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	95
A.21	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = \varepsilon = 0$ e $F = 0.1$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	95

A.22	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e $U = 2.5$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	96
A.23	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e $U = 3.5$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	96
A.24	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e $U = 4.5$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	97
A.25	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e $U = 3.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	97
A.26	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e $U = 4.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	98
A.27	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $\varepsilon = 0$ , $F = 0.05$ e $U = 5.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	98
A.28	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = 0$ , $F = 0.02$ e $\varepsilon = 0.1$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	99
A.29	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = 0$ , $F = 0.02$ e $\varepsilon = 0.3$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	99
A.30	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = 0$ , $F = 0.02$ e $\varepsilon = 0.5$ , considerando a distribuição inicial delta. . .	100
A.31	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = 0$ , $F = 0.02$ e $\varepsilon = 0.1$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	100
A.32	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = 0$ , $F = 0.02$ e $\varepsilon = 0.3$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	101
A.33	Evolução temporal da amplitude de probabilidade $ \psi_j(t) ^2$ para os parâmetros $U = 0$ , $F = 0.02$ e $\varepsilon = 0.5$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com $\sigma = 5$ . . . . .	101



## Resumo

Nesta dissertação é feito um estudo numérico da evolução temporal das soluções da equação de Schrödinger não linear unidimensional discreta, considerando os efeitos de um potencial aperiódico (ou desordenado) e a influência de um campo elétrico dc externo. A análise feita tem como foco principal a caracterização das soluções como sendo estendidas ou localizadas, de acordo com a intensidade da não-linearidade ou correlação ( $U$ ), da desordem ( $\varepsilon$ ) e do campo elétrico ( $F$ ), sendo que estas são dadas em unidades do hopping ( $V$ ), sendo este o termo associado com a probabilidade da partícula pular a sítios vizinhos. Além disso, consideramos a influência de duas condições iniciais específicas: somente o sítio central da rede populado (distribuição delta), e uma distribuição gaussiana centrada no sítio central da rede com desvio padrão  $\sigma = 5$  (distribuição gaussiana).

A equação de Schrödinger estudada, descrita pela aproximação tight-binding, é resolvida numericamente através do algoritmo conhecido como método de Crank-Nicholson, que fornece a evolução temporal das amplitudes da função de onda (amplitudes de Wannier) em cada sítio da rede, mantendo a normalização da função de onda total, fornecendo assim a evolução dinâmica da probabilidade de encontrar a partícula em cada sítio. Utilizando as amplitudes de Wannier, algumas funções auxiliares locais e globais são calculadas a fim de obter informações importantes sobre a distribuição do pacote na rede ao longo do tempo, sendo elas a entropia de Shannon, o número de participação de Wegner, a função de Anderson e o centroide da distribuição. A análise dos resultados é feita através da análise gráfica do perfil do pacote de ondas na rede e da evolução temporal das funções auxiliares.

Baseando-se nesta análise, pode-se perceber que tanto o aumento da intensidade da correlação como da desordem tendem a localizar o pacote de ondas, sendo que, para distribuições iniciais específicas, existem regiões de parâmetros onde o aumento da localização é acentuado e abrupto, permitindo-nos, em alguns casos, definir limiares de transição bem claros entre regiões de estados estendidos e localizados.

Com a inserção do campo elétrico externo, pode-se observar um comportamento oscilatório do pacote de ondas, cuja forma depende das condições iniciais, com um período dependente do inverso do módulo do campo elétrico ( $F$ ), caracterizando assim um efeito conhecido como oscilação de Bloch.

A consideração destes três efeitos, não apenas isoladamente, mas associados conjuntamente, apresenta interessantes padrões de localização dinâmica, principalmente nos casos com campo elétrico, onde o incremento da desordem e da correlação destroem as oscilações de Bloch e acabam localizando o pacote de ondas, de maneiras diferentes.



# Abstract

This dissertation presents a numerical study of the one-dimensional discrete non-linear Schrödinger equation considering the effects of an aperiodic (or disordered) potential and the influence of a dc external electric field. The analysis is focused on the characterization of the solutions to be extended or localized, according to the intensity of non-linearity or correlation ( $U$ ), disorder ( $\varepsilon$ ) and electric field ( $F$ ), and these are given in units of the hopping ( $V$ ), the term associated with the probability of the particle to hop to nearest sites. We also consider the influence of two specific initial conditions: only the central site of the lattice populated (delta distribution), and a Gaussian distribution centered on the central lattice site with a standard deviation  $\sigma = 5$  (gaussian distribution).

The Schrödinger equation studied, described by the tight-binding approximation, is solved numerically using the algorithm known as the Crank-Nicholson method, which provides the temporal evolution of the amplitudes of the wave function (Wannier amplitudes) at each lattice site, keeping the normalization of the total wave function, thereby providing the dynamic evolution of the probability of finding the particle at each site. Using the Wannier amplitudes, some auxiliary local and global functions are calculated to obtain important information about the distribution of the packet on the lattice, these being the Shannon entropy, the number of participation of Wegner, the function of Anderson and the centroid of the distribution. The analysis of the results is done through the graphical analysis of the profile of the wave packet in the lattice and the temporal evolution of the auxiliary functions.

Based on this analysis, one can see that both the increased intensity of correlation and the disorder tend to localize the wave packet, and, for specific initial distributions, there are regions of parameters where the increase in localization is sharp and abrupt allowing us, in some cases, to set clear transition thresholds between regions of extended and localized states.

With the introduction of the external electric field, one can observe an oscillatory behavior of the wave packet, whose form depends on the initial conditions, with a period dependent on the inverse of the module of the electric field ( $F$ ), thus demonstrating an effect known as Bloch oscillation.

Considering these three effects, not only individually, but linked together, it presents interesting patterns of dynamical localization, especially in the case with the electric field, where the increase of disorder and correlation destroy the Bloch oscillations and end up localizing the wave packet, in different ways.



## Capítulo 1

# Introdução e motivação

Uma parcela significativa dos modelos matemáticos que representam sistemas físicos utilizam equações diferenciais para calcular a variação no tempo e no espaço de uma determinada grandeza física. Como exemplo deste tipo de modelo podemos citar a equação da onda

$$\frac{\partial^2 u(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

que modela a propagação de uma onda em um determinado meio e fornece a variação do deslocamento  $u(\vec{r}, t)$  no espaço e no tempo, sendo  $c$  a velocidade (constante) de propagação da onda neste meio; a equação da difusão:

$$\frac{\partial \varphi(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \varphi(\vec{r}, t) \quad (1.2)$$

que modela a difusão de um fluido e fornece a variação da densidade  $\varphi(\vec{r}, t)$  em função do espaço e do tempo, sendo  $D$  a constante de difusão; a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V^{ext}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.3)$$

que modela todo sistema quântico, nos dando a função de onda associada as partículas deste sistema em função do tempo e da posição, entre outras. Apesar de ser uma ferramenta matemática de inestimável valor, o conjunto de equações diferenciais que possuem solução analítica é muito restrito, dificultando enormemente a obtenção de soluções teóricas para os sistemas representados por equações que não pertencem a este restrito conjunto.

A grande maioria dos sistemas físicos encontrados na natureza possuem grande complexidade, apresentando um número muito grande de interações, das mais diversas espécies, tornando praticamente impossível levar em consideração todas estas interações internas e externas em um modelo matemático, ou tornando este modelo insolúvel analiticamente. Muitas destas interações, em geral, são conhecidas e tem efeito pouco significativo sobre

o sistema, de forma que podem ser desprezadas sem grande perda de informação no resultado final. Porém, alguma (ou algumas) interação sempre tem importância central na caracterização do sistema, e na maioria das vezes esta interação possui uma representação matemática complicada, sendo assim, apesar desse efeito não ser desprezado, algumas considerações são feitas no intuito de simplificar a modelagem destes sistemas. Neste ponto, a linearidade tem papel fundamental na física.

É sabido que alguns sistemas físicos possuem comportamento aproximadamente linear sob circunstâncias específicas. Como exemplo podemos citar a dinâmica de um pêndulo, onde o deslocamento angular  $\theta$  é fornecido pela equação diferencial dependente de  $\sin \theta$

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0 \quad (1.4)$$

sendo  $g$  a aceleração gravitacional e  $l$  o comprimento do pêndulo. Porém, como sabemos, para  $\theta \ll 1$ , temos que  $\sin \theta \approx \theta$ , permitindo a utilização da aproximação linear a fim de tornar o sistema mais simples de se resolver. A expressiva redução na dificuldade de resolução de problemas lineares se dá devido a propriedade de superposição linear de soluções apresentadas por tais sistemas. Esta propriedade diz que, se  $\phi_1, \phi_2, \dots$  são soluções de uma equação linear, então  $\Phi = \alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2 + \dots$  também o é, sendo os  $\alpha_i$  constantes. Desta forma, um comportamento complexo deste sistema pode ser decomposto como uma superposição de soluções elementares mais simples, que são conhecidas como modos do sistema.

Apesar da importância da utilização de abordagens lineares em diversos contextos na física, a consideração de efeitos não lineares se faz necessária na modelagem de muitos sistemas, mas, apesar da percepção desta necessidade, a falta de ferramentas teóricas e principalmente computacionais impossibilitou o tratamento de problemas mais complexos durante muitos anos de pesquisa, limitando os trabalhos nestas áreas a usarem quase sempre tratamentos perturbativos. Todavia, a explosão no desenvolvimento da tecnologia no ramo da informática resultou na construção de computadores com grande capacidade de processamento, tornando possível resolver numericamente diversas equações não lineares insolúveis ou de solução demasiadamente complicada. O advento de ferramentas numéricas que permitem estudar sistemas mais complexos incitou um aumento significativo nas pesquisas sobre sistemas não lineares em diferentes contextos, tanto numérica como analiticamente [1].

## 1.1 A equação de Schrödinger não linear

Dentre as diversas equações não-lineares utilizadas na física, existe uma de especial valor, conhecida como a equação de Schrödinger não linear (NLSE, do inglês *Non-Linear Schrödinger Equation*), dada genericamente por

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V^{ext}(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) + U|\psi(\vec{r}, t)|^2\psi(\vec{r}, t). \quad (1.5)$$

Nesta dissertação, estudaremos a versão unidimensional discreta desta equação (DNLSE), dada por (ver seção 2.3)

$$i\hbar \frac{\partial \psi_j}{\partial t} = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + V_j^{ext}\psi_j + U|\psi_j|^2\psi_j. \quad (1.6)$$

A principal característica da DNLSE, e o que torna seu estudo e entendimento tão importantes, é sua ubiquidade, modelando o comportamento de diferentes sistemas em diversos ramos da física.

Um exemplo extremamente importante de aplicação desta equação pode ser encontrado no estudo de sistemas quânticos no contexto da física de estado sólido, onde sob certas circunstâncias ela pode ser usada na modelagem da dinâmica de um elétron em uma rede metálica ou semicondutora.

Uma aproximação comumente utilizada para representar um metal ou um semicondutor é considerá-los como sendo um arranjo periódico de íons pesados circundados por uma nuvem eletrônica, de forma que o sistema é mantido ligado através de forças eletrostáticas. A dinâmica de um elétron neste material é fortemente afetada pela periodicidade do potencial gerado pelos íons da rede, bem como pela vibração destes íons em torno de sua posição de equilíbrio, desta forma, o fato de o elétron ter carga negativa e os íons terem carga positiva faz com que ambos interajam conforme este elétron se desloca, causando uma deformação local na rede, de modo que este elétron acompanhado de sua deformação local constituem uma quasi-partícula conhecida como pólaron. Quando a deformação da rede é muito acentuada, pode ocorrer um fenômeno chamado "selftrapping", onde o pólaron torna-se praticamente imóvel devido ao fato do elétron permanecer preso no potencial criado pela deformação causada por ele mesmo. Neste sistema, a equação que modela a dinâmica da distribuição eletrônica, em uma dimensão, é dada pela DNLSE

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

onde  $|\psi_n|^2$  é a densidade de probabilidade de encontrar o elétron no  $n$ -ésimo sítio da rede, sendo que os sítios estão associados aos íons do material. Analisando a equação (1.7),

podemos ver que ela relaciona a taxa de variação da função de onda do elétron, ou seja, relaciona a variação da probabilidade de encontrar o elétron em cada sítio da rede com dois termos diferentes, o primeiro termo do lado direito da equação é o termo cinético, sendo que o parâmetro  $V$ , conhecido como *hopping*, está associado com a probabilidade da partícula passar à sítios vizinhos, este termo tende a estender a densidade de probabilidade eletrônica na rede; já o segundo termo representa um potencial local associado com a deformação da rede, que tende a localizar dinamicamente a partícula, neste termo o parâmetro  $U$  está associado com a intensidade da interação da partícula com o potencial local deformado da rede.

O resultado dessa competição entre deslocalização, estimulada pelo termo cinético, e localização, estimulado pelo termo não linear, acaba sendo de crucial importância para a caracterização da dinâmica da partícula. Estudos numéricos da equação (1.7) [2, 3] mostram que, para  $U = 0$ , a função de onda da partícula se espalha completamente na rede, caracterizando uma alta mobilidade do elétron, porém, ao incrementarmos o módulo de  $U$ , a deslocalização da partícula torna-se cada vez mais lenta, até que se atinja um valor limite onde a maior parte da função de onda permanece localizada na região da rede onde a partícula foi inicialmente lançada. Neste caso, podemos dizer que o elétron está no regime "selftrapping". Este limiar de localização separa estados metálicos ( $U$  abaixo do valor crítico), de estados isolantes ( $U$  acima do valor crítico), mostrando que o efeito da não-linearidade tem papel importante na caracterização do fluxo de corrente em sólidos, de forma que, quando se tem controle sobre a intensidade desta não-linearidade, torna-se possível controlar e manipular a corrente elétrica em um material de acordo com as exigências de sua aplicação. A influência significativa do termo não linear na corrente elétrica evidencia a importância do estudo da DNLSE no contexto da física de estado sólido, visando o desenvolvimento de materiais que contribuam cada vez mais com a evolução tecnológica de dispositivos eletrônicos.

Outro contexto onde o estudo da DNLSE se revela extremamente importante é o da óptica não linear, descrevendo o comportamento de campos eletromagnéticos em materiais não lineares. Quando um pulso de luz se propaga no interior de uma fibra óptica dita linear, ou seja, quando o material interno a essa fibra apresenta um campo de polarização linearmente proporcional ao campo elétrico aplicado, a diferença entre os índices de refração dos materiais interno e externo à fibra confina este pulso a se deslocar na parte interna desta guia de onda, este é o princípio básico do funcionamento das fibras ópticas, muito utilizadas para transmissão de informação devido ao fato da velocidade da transmissão ser

muito maior do que a apresentada em processos eletrônicos. Visando o aperfeiçoamento na tecnologia destas fibras ópticas, o estudo de materiais que apresentam fenômenos ópticos não lineares ganhou força, desencadeando uma série de pesquisas teóricas e experimentais nesta área.

Dentre estes fenômenos ópticos não lineares estudados está o chamado efeito Kerr, descoberto pelo físico escocês John Kerr em 1877 [4], caracterizado por uma mudança no índice de refração no meio material devido a aplicação de um campo elétrico, de forma que essa variação apresenta dependência com o quadrado deste campo. Os materiais que apresentam este fenômeno, conhecidos por meios Kerr, tem a polarização não mais apenas linearmente proporcional ao campo elétrico aplicado, como nos meios lineares, mas proporcional também ao cubo deste campo. Um efeito importante apresentado por estes materiais é que a simples presença dos campos eletromagnéticos que caracterizam a luz se propagando dentro deste material já produz uma variação no índice de refração através do caminho onde o pulso se propaga, fazendo com que o pulso "crie" seu próprio caminho dentro deste material, este efeito é conhecido como auto-focalização (*self-focusing*) e está relacionado com a formação de sólitons ópticos, que representam basicamente pulsos ópticos que se propagam sem alteração significativa no seu formato.

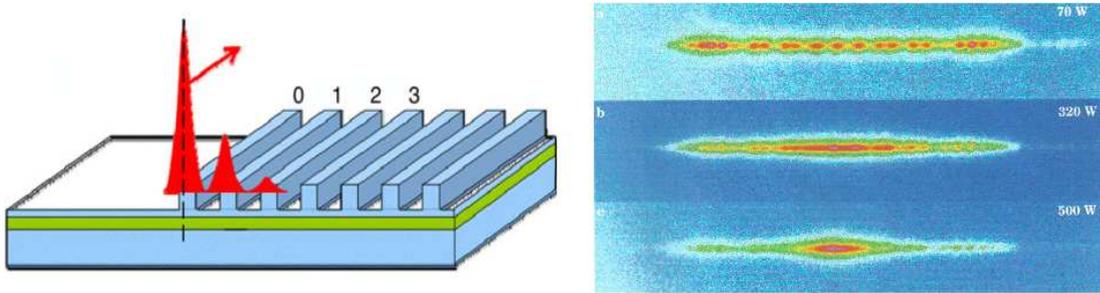
Se considerarmos um conjunto muito grande de fibras ópticas não lineares unidimensionais dispostas lado a lado de forma equidistante, a equação que descreverá a evolução do campo elétrico em cada fibra ( $E_j$ ) é dada por [1]

$$i \frac{dE_j}{dz} = V(E_{j+1} + E_{j-1}) + \beta E_j + PQ|E_j|^2 E_j \quad (1.8)$$

onde  $V$  é a constante de acoplamento entre as fibras,  $\beta$  é a constante de propagação linear,  $P$  é a potência de entrada e  $Q$  é o termo de terceira ordem da susceptibilidade dielétrica que caracteriza a não-linearidade intrínseca da fibra. Reinterpretando os termos e as variáveis, vemos claramente que (1.8) é a DNLS.

Estudos experimentais feitos no sistema descrito acima mostraram que, ao acoplar luz na guia de onda central deste conjunto ( $E_j = \delta_{j,0}$ ) utilizando uma potência de entrada  $P$  relativamente baixa, observa-se que parte da amplitude do campo elétrico passa para as fibras vizinhas de forma que o pulso vai se espalhando pelo conjunto de fibras. Porém, com o incremento da potência de entrada, observa-se que o percentual de intensidade que passa para as fibras vizinhas diminui significativamente e o pulso permanece localizado nas fibras mais próximas daquela onde a luz foi acoplada (ver figura 1.1), esta distribuição localizada é chamada de sóliton espacial discreto [5]. Este comportamento é exatamente

o mesmo encontrado na solução numérica da DNLSE citadas anteriormente (fazendo a reinterpretação  $PQ \rightarrow U$ ).



**Fig. 1.1:** **Figura da esquerda:** *Ilustração do aparato experimental que representa o conjunto linear de guias de onda. A intensidade do campo elétrico em cada guia é representada em vermelho.* **Figura da direita:** *Visão frontal da saída do conjunto de guias de ondas, considerando diferentes valores para a potência de entrada  $P$ . Perceba que o aumento da potência gera localização das amplitudes do campo em torno da guia de onda central (figura retirada da referência [6]).*

Desta forma vemos que, assim como no contexto da física de estado sólido, onde o controle da não-linearidade nos permite manipular a corrente elétrica em determinado material, na óptica o controle da intensidade da não-linearidade nos permite produzir pulsos luminosos com baixa dispersão e difração, possibilitando a transmissão de pulsos coerentes através de grandes tempos e distâncias. Devido a enorme velocidade na transmissão de informação através de pulsos luminosos e da capacidade de conversão destes pulsos em corrente elétrica e vice-versa, o estudo e desenvolvimento na tecnologia de guias de onda ópticas mostram-se extremamente importantes, principalmente visando a otimização de processos de transmissão e processamento de informação. Como exemplo de aplicação tecnológica neste contexto podemos citar a construção de computadores ópticos, que possibilitariam um aumento significativo na capacidade de processamento em comparação com a tecnologia atual.

Além da importância na física de estado sólido e na ótica não linear, a NLSE aparece também no contexto dos condensados de Bose-Einstein, descrevendo a dinâmica de um condensado sob a luz da aproximação de campo médio.

Para um conjunto de bósons fracamente interagentes, podemos associar um comprimento de onda térmico de de Broglie a cada uma destas partículas. Este comprimento de

onda é dado por

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \quad (1.9)$$

onde  $h$  é a constante de Planck,  $m$  é a massa do bóson,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura do condensado. Quando este conjunto de partículas é resfriado até temperaturas onde  $\lambda_{dB}$  passa a ser maior do que a distância média entre as partículas, as funções de onda das partículas individuais se superpõem consideravelmente, de modo que todo o conjunto passa a se comportar como uma única onda de matéria coerente. Este estado condensado de bósons, que evidencia a natureza quântica do sistema, foi inicialmente previsto por Albert Einstein em 1925, após analisar as idéias do físico indiano Satyendra N. Bose sobre o assunto. Em homenagem a ambos, este estado da matéria foi denominado condensado de Bose-Einstein (BEC).

Quando a teoria de campo médio é utilizada na descrição do BEC, pode-se derivar uma equação que descreve a dinâmica e interação bosônica neste sistema, fornecendo a evolução da função de onda coletiva  $\Phi(\vec{r}, t)$  do condensado. Esta equação é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\vec{r}, t) + V^{ext}(\vec{r}) \Phi(\vec{r}, t) + U_0 |\Phi(\vec{r}, t)|^2 \Phi(\vec{r}, t) \quad (1.10)$$

onde  $U_0$  está relacionado com a intensidade da interação entre os bósons e  $V^{ext}(\vec{r})$  corresponde a um potencial externo, sendo geralmente utilizado um potencial harmônico a fim de confinar o condensado. A equação (1.10), conhecida como equação de Gross-Pitaevskii, foi derivada independentemente por Lev P. Pitaevskii e Eugene P. Gross em 1961 [7, 8]. Observando (1.10), vemos claramente que se trata de uma versão da NLSE.

Apesar da previsão teórica da existência dos condensados de Bose-Einstein já ser de longa data, as primeiras verificações experimentais são relativamente recentes [9], de forma que, após a confirmação experimental, diversas pesquisas foram e ainda são feitas buscando um entendimento mais profundo deste interessante estado da matéria, que apresenta comportamento anômalo a nível macroscópico, como superfluidade e vórtices quânticos. Apesar da grande e recente mobilização científica na direção dos BEC, existe muita coisa ainda a ser estudada e analisada nesta área, principalmente no que diz respeito à compreensão das propriedades destes condensados e suas possíveis aplicações tecnológicas.

A grande diversidade de contextos onde a NLSE aparece modelando sistemas físicos importantes e o relativo desconhecimento das características de suas soluções motivaram o estudo desta equação nesta dissertação. Além disso, a fim de enriquecer ainda mais nosso trabalho, estudaremos também o efeito da introdução de desordem aperiódica e de um

campo elétrico de externo no sistema, permitindo-nos analisar os efeitos da interação da correlação (não-linearidade) com a desordem, bem como estudar os efeitos da correlação e da desordem nas oscilações de Bloch, resultantes da aplicação deste campo.

## 1.2 Desordem aperiódica e campo elétrico

Na física, como argumentamos anteriormente, muitas considerações simplificadoras são usualmente feitas quando se deseja estudar um sistema que possui alta complexidade, objetivando tornar menos difícil o seu tratamento. Como exemplo deste tipo de simplificação, podemos considerar a aproximação citada acima, utilizada muitas vezes no contexto da física de estado sólido, onde a caracterização da dinâmica eletrônica em um determinado material é feita descrevendo este como sendo composto de elétrons ligados a um arranjo de íons iguais cuja distribuição respeita uma determinada periodicidade espacial, facilitando assim o estudo teórico do sistema. Porém, a realidade nos mostra que em apenas alguns casos esta consideração apresenta resultados satisfatórios, tendo em vista o fato de que a estrutura de muitos materiais reais não apresentam periodicidade espacial (sólidos amorfos, por exemplo) e/ou no tipo de íons componentes deste material (materiais dopados ou com impurezas, por exemplo).

A desordem também aparece no contexto da óptica, por exemplo, quando um pulso de luz se desloca através de um conjunto de guias de onda colineares (mesmo sistema citado na exemplificação do uso da DNLSE na óptica), onde a constante dielétrica em cada uma destas guias é diferente. Esta falta de regularidade caracteriza o sistema desordenado, e a consideração desta desordem, além de proporcionar uma descrição mais fiel do sistema, nos permite enxergar alguns fenômenos ausentes em modelos de sistemas ordenados.

Dentre os diversos modelos que representam sistemas desordenados, consideraremos nesta dissertação o efeito da desordem aperiódica determinística, representada pelo modelo de Aubry-André [10]. Neste modelo, inserimos o termo

$$\varepsilon_j = \varepsilon \cos(2\pi\mu(j - j_0)) \quad (1.11)$$

na DNLSE, onde  $\varepsilon$  é a constante que regula o grau de desordem do sistema,  $j_0$  é o sítio central da rede e  $\mu = (\sqrt{5} + 1)/2$  é a chamada razão áurea, um número irracional que torna o período do cosseno incomensurável com o período da rede. Em 1980, Serge Aubry e Gilles André [10] mostraram que este modelo possui um limiar de transição entre

estados localizados e estados estendidos em  $\varepsilon/V = 2$ , com deslocalização para  $\varepsilon/V < 2$  e localização para  $\varepsilon/V > 2$ .

Os efeitos da consideração conjunta da correlação e da desordem constituem um tema ainda aberto na física, de forma que muitos trabalhos importantes foram publicados nesta área nos últimos tempos [11, 12, 13, 14].

Também consideraremos em nosso estudo da DNLSE o efeito de um termo que modela a aplicação de um campo elétrico de externo ao sistema. Em 1928, o físico suíço Felix Bloch previu que um portador de carga localizado em uma rede cristalina ideal sujeito a um campo elétrico de apresentaria oscilações periódicas em sua dinâmica [15], conhecidas como oscilações de Bloch.

Para representarmos a introdução de um campo elétrico de externo no sistema, adicionamos na DNLSE o termo correspondente a este campo, dado por

$$F_j = eFa(j - j_0) \quad (1.12)$$

onde  $e$  é a carga da partícula,  $a$  é o parâmetro de rede e  $F$  é o módulo do campo elétrico externo constante. As previsões teóricas, que serão expostas e argumentadas no decorrer deste trabalho, preveem que uma partícula localizada em uma rede periódica sujeita a este campo realiza uma oscilação com período

$$T_B = \frac{h}{eFa}, \quad (1.13)$$

conhecido como período de Bloch [16].

Apesar da previsão teórica das oscilações de Bloch ser bastante antiga, dificuldades experimentais impediram a sua comprovação por muitos anos. Porém, atualmente um grande número de trabalhos experimentais vem sendo realizado nos mais diversos ramos da física, como por exemplo em super-redes semicondutoras [17, 18, 19], em condensados de Bose-Einstein [20, 21], em sólitons magnéticos [22], em guias de onda óticas [23], entre outros.

Motivados pelas argumentações apresentadas neste capítulo, realizamos nesta dissertação o estudo da equação de Schrödinger não linear discreta em uma dimensão, com desordem aperiódica e campo elétrico de externo aplicado, dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi_j}{\partial t} = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + \varepsilon_j \psi_j + F_j \psi_j + U|\psi_j|^2 \psi_j, \quad (1.14)$$

tendo como escopo principal a caracterização de localização dinâmica nas soluções desta equação em termos da intensidade da correlação ( $U$ ), da desordem ( $\varepsilon$ ) e do campo elétrico ( $F$ ).



## Capítulo 2

# A equação de Schrödinger não linear

Inúmeros fenômenos físicos na natureza apresentam comportamento não linear, de forma que podemos encontrar sistemas físicos descritos por equações não lineares em diversos contextos. Dentre estes fenômenos podemos citar como exemplo, sólitons óticos em conjuntos de guias de onda [5], dinâmica de biopolímeros [24], dinâmica não linear do DNA [25], entre outros. Diversos estudos sobre sistemas não lineares foram feitos também no contexto da mecânica quântica, como por exemplo nos condensados de Bose-Einstein [26, 27], na física de supercondutores de alta temperatura crítica [28], em super-redes semicondutoras [29], entre outros. A grande variedade de sistemas, pertencentes aos mais diversificados contextos, que apresentam comportamento não linear tornam interessante, pela sua ubiquidade, o estudo deste fenômeno.

Nesta dissertação consideraremos o efeito de uma não linearidade cúbica adicionada a equação de Schrödinger, representando uma interação local no sistema quântico analisado.

### 2.1 Caso de bósons interagentes

O Hamiltoniano de um sistema quântico de bósons de spin 0, com interação entre as partículas que o compõem e com um potencial externo é dado, na notação de segunda quantização, por

$$\begin{aligned} \widehat{H} = & \int d\vec{r} \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) \right) \widehat{\Psi}(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \widehat{\Psi}(\vec{r}') \widehat{\Psi}(\vec{r}); \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$[\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad , \quad [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{\Psi}(\vec{r}')] = [\widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}), \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = 0 \quad (2.2)$$

onde  $V^{ext}(\vec{r})$  representa o potencial externo,  $V(\vec{r} - \vec{r}')$  representa o potencial de interação entre as partículas (correlação) e as relações de comutação 2.2 são válidas para bósons.

Na descrição de Heisenberg, a evolução temporal dos operadores de campo bosônicos é dada por

$$\widehat{\Psi}(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) \widehat{\Psi}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) \quad (2.3)$$

e a equação de Heisenberg que fornece a evolução temporal de um operador é

$$i\hbar \frac{d\widehat{\Psi}(\vec{r}, t)}{dt} = [\widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{H}]. \quad (2.4)$$

Utilizando o Hamiltoniano (2.1) temos

$$\begin{aligned} [\widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{H}] &= \left[ \exp\left(\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) \widehat{\Psi}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right), \widehat{H} \right] \\ &= \exp\left(\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{H}] \exp\left(-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) \\ &= \exp\left(\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) ([\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{H}_0] + [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{H}_1]) \exp\left(-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

sendo

$$\begin{aligned} \widehat{H} &\equiv \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1 \\ \widehat{H}_0 &= \int d\vec{r} \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) \right) \widehat{\Psi}(\vec{r}) \\ \widehat{H}_1 &= \frac{1}{2} \int \int d\vec{r}' d\vec{r}'' \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'') V(\vec{r}' - \vec{r}'') \widehat{\Psi}(\vec{r}') \widehat{\Psi}(\vec{r}'') \end{aligned} \quad (2.6)$$

Resolvendo para o Hamiltoniano  $\widehat{H}_0$  temos

$$\begin{aligned} [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{H}_0] &= \left[ \widehat{\Psi}(\vec{r}), \int d\vec{r}' \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V^{ext}(\vec{r}') \right) \widehat{\Psi}(\vec{r}') \right] \\ &= \int d\vec{r}' [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V^{ext}(\vec{r}') \right) \widehat{\Psi}(\vec{r}') \\ &= \int d\vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V^{ext}(\vec{r}') \right) \widehat{\Psi}(\vec{r}') \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) \right) \widehat{\Psi}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Para o Hamiltoniano  $\widehat{H}_1$  temos

$$\begin{aligned} [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{H}_1] &= \left[ \widehat{\Psi}(\vec{r}), \frac{1}{2} \int \int d\vec{r}' d\vec{r}'' \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'') V(\vec{r}' - \vec{r}'') \widehat{\Psi}(\vec{r}') \widehat{\Psi}(\vec{r}'') \right] \\ &= \frac{1}{2} \int \int d\vec{r}' d\vec{r}'' [\widehat{\Psi}(\vec{r}), \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \widehat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'')] V(\vec{r}' - \vec{r}'') \widehat{\Psi}(\vec{r}') \widehat{\Psi}(\vec{r}'') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \int \int d\vec{r}' d\vec{r}'' ([\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'') + \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') [\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'')]) V(\vec{r}' - \vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}') \\
 &= \frac{1}{2} \int \int d\vec{r}' d\vec{r}'' (\delta(\vec{r}' - \vec{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'') + \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')) V(\vec{r}' - \vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}') \\
 &= \frac{1}{2} \int d\vec{r}'' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'') V(\vec{r}' - \vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}') + \frac{1}{2} \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \\
 &= \left( \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \right) \hat{\Psi}(\vec{r}') \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

Desta forma obtemos

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{H}] = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \right) \hat{\Psi}(\vec{r}) \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned}
 &[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) [\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{H}] \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \\
 &= \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \right) \hat{\Psi}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \quad (2.10)
 \end{aligned}$$

considerando uma interação local entre as partículas, ou seja, fazendo

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = U\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.11)$$

onde  $U$  representa a intensidade desta interação, temos

$$\begin{aligned}
 &[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) + U|\hat{\Psi}(\vec{r})|^2 \right) \hat{\Psi}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \\
 &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\vec{r}) + U|\hat{\Psi}(\vec{r}, t)|^2 \right) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (2.12)
 \end{aligned}$$

Assim, utilizando (2.4), nossa equação de Schrödinger não linear fica

$$i\hbar \frac{d\hat{\Psi}(\vec{r}, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + V^{ext}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + U|\hat{\Psi}(\vec{r}, t)|^2 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

No contexto da física de sistemas eletrônicos correlacionados, esta equação é popularmente conhecida como equação de Schrödinger não linear, já no contexto da física dos condensados de Bose-Einstein, é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii [8, 7].

## 2.2 Conservação da norma

Sabemos que um dos fundamentos básicos da mecânica quântica consiste em considerar a equação de Schrödinger como sendo uma equação linear, para que seja válido o princípio de

superposição de soluções. Apesar disso, alguns autores ([2, 3, 30], por exemplo) utilizam a equação de Schrödinger não linear, dando a tradicional interpretação estatística à função de onda por esta calculada, já que neste caso, além do Hamiltoniano, a norma  $R$  do sistema, dada por

$$R = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx \quad (2.14)$$

também se conserva. Para mostrar a conservação da norma em nosso sistema, consideremos a nossa equação de Schrödinger não linear (2.13), em uma dimensão

$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} + V^{ext}(x) \psi(x, t) + U|\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) \quad (2.15)$$

$$\frac{d\psi(x, t)}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} - \frac{i}{\hbar} V^{ext}(x) \psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} U|\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) \quad (2.16)$$

Tomando o complexo conjugado

$$\frac{d\psi^*(x, t)}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2\psi^*(x, t)}{dx^2} + \frac{i}{\hbar} V^{ext}(x) \psi^*(x, t) + \frac{i}{\hbar} U|\psi(x, t)|^2 \psi^*(x, t) \quad (2.17)$$

Escrevemos a norma como sendo

$$R = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx \quad (2.18)$$

derivando no tempo temos

$$\frac{dR}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dt} + \frac{d\psi^*(x, t)}{dt} \psi(x, t) \right) dx \quad (2.19)$$

Substituindo (2.16) e (2.17) na equação acima temos

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} - \frac{i}{\hbar} V^{ext}(x) \psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} U|\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) \right) \psi^*(x, t) dx \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2\psi^*(x, t)}{dx^2} + \frac{i}{\hbar} V^{ext}(x) \psi^*(x, t) + \frac{i}{\hbar} U|\psi(x, t)|^2 \psi^*(x, t) \right) \psi(x, t) dx \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\frac{dR}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \psi^*(x, t) \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} - \frac{d^2\psi^*(x, t)}{dx^2} \psi(x, t) \right) dx \quad (2.21)$$

vendo que

$$\frac{d}{dx} \left( \psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right) = \psi^*(x, t) \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} - \frac{d^2\psi^*(x, t)}{dx^2} \psi(x, t) \quad (2.22)$$

temos

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \left( \psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right) dx \\ &= \left( \frac{d\psi(x, t)}{dx} \psi^*(x, t) - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde a última igualdade se dá pois

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x, t) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi^*(x, t) = 0 \quad (2.24)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{d\psi(x, t)}{dx} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} = 0 \quad (2.25)$$

Isso nos mostra que

$$\frac{dR}{dt} = 0 \quad (2.26)$$

e, portanto, a norma  $R$  é uma constante, ou seja, se a função de onda está inicialmente normalizada, esta permanece assim por qualquer tempo futuro.

## 2.3 Limite tight-binding unidimensional

A fim de introduzir a aproximação de elétrons fortemente ligados (tight-binding), analisamos nosso sistema no contexto da física do estado sólido, considerando nossa rede unidimensional como sendo um arranjo de átomos igualmente espaçados e analisando a dinâmica de um elétron nesta rede.

Se as bandas são estreitas, estaremos em uma condição próxima a de átomos isolados (onde as bandas tem largura zero), desta forma, torna-se conveniente descrever o estado quântico do elétron como uma combinação de funções bem localizadas em cada átomo centralizado nos pontos da rede, estas são conhecidas como funções de Wannier [31].

As funções de Wannier formam um conjunto ortonormal de funções localizadas em cada um dos  $N$  átomos constituintes da rede, e são construídas como uma combinação de orbitais atômicos (dos átomos isolados). A função de onda total do sistema pode ser descrita como

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^N \psi_{nj}(t) w_n(x - ja) \quad (2.27)$$

onde as  $w_n(x - ja)$  são as funções de Wannier ( $a$  é o parâmetro de rede,  $j$  é o índice de sítio e  $n$  o índice de banda) e as  $\psi_{nj}(t)$  representam o peso com que cada função de Wannier contribui para a função de onda total. Podemos associar as funções de Wannier a vetores que formam uma base ortonormal no espaço de Hilbert:

$$w_n(x - ja) \rightarrow |nj\rangle \quad (2.28)$$

de forma que podemos escrever a equação (2.27) como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,j} \psi_{nj}(t) |nj\rangle. \quad (2.29)$$

Se as funções de Wannier constituem uma base ortonormal no espaço de Hilbert, temos que

$$\sum_{n,j} |nj\rangle\langle nj| = I \quad (2.30)$$

sendo  $I$  a matriz identidade. Assim, representando o Hamiltoniano do sistema como um operador no espaço de Hilbert, temos

$$H \rightarrow \widehat{H} = \sum_{n,j} \sum_{m,i} |nj\rangle\langle nj| \widehat{H} |mi\rangle\langle mi| = \sum_{n,j} \sum_{m,i} |nj\rangle H_{nj,mi} \langle mi| \quad (2.31)$$

Na aproximação tight-binding, consideramos que as funções de Wannier não diferem muito das funções que descrevem os orbitais atômicos dos átomos isolados, sendo assim, considerando orbitais não degenerados e considerando apenas o último nível orbital como sendo parcialmente ocupado (permitindo-nos omitir o índice de banda), o nosso Hamiltoniano tight-binding pode ser escrito como:

$$H = - \sum_{j,i} V_{ji} |j\rangle\langle i| + \sum_j E_j |j\rangle\langle j| \quad (2.32)$$

onde  $E_j \equiv H_{jj}$  é a energia de base da banda considerada no sítio  $j$ , e  $V_{ji} \equiv -H_{ji}$  ( $i \neq j$ ) é chamado de *hopping* e corresponde a energia relacionada à transferência de um elétron do sítio  $j$  para o  $i$ . Neste trabalho, consideraremos que apenas as interações entre primeiros vizinhos são relevantes e que estas tem amplitude constante, de forma que o Hamiltoniano é dado por

$$\begin{aligned} H &= -V \sum_j (|j\rangle\langle j+1| + |j\rangle\langle j-1|) + \sum_j E_j |j\rangle\langle j| \\ &= -V \sum_j (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) + \sum_j E_j |j\rangle\langle j| \end{aligned} \quad (2.33)$$

sendo que a última igualdade vale para uma rede infinita.

Sob a luz da aproximação tight-binding, o Hamiltoniano de nosso sistema pode ser escrito como

$$\widehat{H} = -V \sum_j (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) + \sum_j V_j^{ext} |j\rangle\langle j| + U \sum_j |\psi_j|^2 |j\rangle\langle j| \quad (2.34)$$

E nossa equação de Schrödinger não linear discreta é dada por:

$$i\hbar \frac{d\psi_j}{dt} = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + V_j^{ext} \psi_j + U |\psi_j|^2 \psi_j \quad (2.35)$$

## 2.4 Solução analítica para o caso não interagente

Se considerarmos o Hamiltoniano tight-binding apresentado anteriormente (2.34), representando um sistema sem potencial externo ( $V_j^{ext} = 0$ ) e sem interação local entre as partículas ( $U = 0$ ), o nosso Hamiltoniano se reduz a

$$\widehat{H} = -V \sum_j (|j\rangle\langle j+1| + |j\rangle\langle j-1|) \quad (2.36)$$

e a equação de Schrödinger não linear discreta (2.35) fica

$$i\hbar \frac{d\psi_j}{dt} = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}). \quad (2.37)$$

O vetor de onda  $|k\rangle$  em uma rede discreta pode ser escrito como

$$|k\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikja} |j\rangle \quad (2.38)$$

sendo  $N$  o número de sítios da rede. Com isso, temos os elementos de matriz

$$\langle k'|\widehat{H}|k\rangle = -V \sum_j (\langle k'|j\rangle\langle j+1|k\rangle + \langle k'|j+1\rangle\langle j|k\rangle) \quad (2.39)$$

onde o primeiro termo do somatório é dado por

$$\begin{aligned} \langle k'|j\rangle\langle j+1|k\rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j'} \sum_{j''} \langle j'|j\rangle\langle j+1|j''\rangle e^{-ik'j'a} e^{ikj''a} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j'} \sum_{j''} e^{i(kj''-k'j')a} \delta_{j,j'} \delta_{j+1,j''} = \frac{1}{N} e^{i(k(j+1)-k'j)a} = \frac{1}{N} e^{ika} e^{i(k-k')ja} \end{aligned} \quad (2.40)$$

já o segundo termo do somatório é dado por

$$\begin{aligned} \langle k'|j+1\rangle\langle j|k\rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j'} \sum_{j''} \langle j'|j+1\rangle\langle j|j''\rangle e^{-ik'j'a} e^{ikj''a} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j'} \sum_{j''} e^{i(kj''-k'j')a} \delta_{j+1,j'} \delta_{j,j''} = \frac{1}{N} e^{i(kj-k'(j+1))a} = \frac{1}{N} e^{-ik'a} e^{i(k-k')ja} \end{aligned} \quad (2.41)$$

de forma que podemos reescrever

$$\begin{aligned} \langle k'|\widehat{H}|k\rangle &= -\frac{V}{N} \sum_j (e^{ika} e^{i(k-k')ja} + e^{-ik'a} e^{i(k-k')ja}) \\ &= -V(e^{ika} + e^{-ik'a}) \frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')ja} = -V(e^{ika} + e^{-ik'a}) \delta_{k,k'} \end{aligned} \quad (2.42)$$

Se os vetores  $|k\rangle$  são uma base do Hamiltoniano (2.36), então podemos escrever

$$\widehat{H}|k'\rangle = E_{k'}|k'\rangle \quad (2.43)$$

sendo assim, multiplicando pela esquerda por  $|k\rangle$  e somando em  $k'$ , temos

$$\sum_{k'} \langle k | \widehat{H} | k' \rangle = \sum_{k'} E_{k'} \langle k | k' \rangle = E_k \quad (2.44)$$

$$E_k = \sum_{k'} \langle k | \widehat{H} | k' \rangle = \sum_{k'} \langle k' | \widehat{H} | k \rangle^* = -V \sum_{k'} (e^{ika} + e^{-ik'a}) \delta_{k,k'} = -V(e^{ika} + e^{-ika}) \quad (2.45)$$

$$E_k = -2V \cos(ka) \quad (2.46)$$

Sabemos que a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \widehat{H}|\Psi(t)\rangle \quad (2.47)$$

pode ser resolvida por separação de variáveis, e a solução fica na forma

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i\widehat{H}t}{\hbar}\right) |\Psi(0)\rangle \quad (2.48)$$

Utilizando a relação de clausura  $\sum_k |k\rangle\langle k| = 1$ , temos

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k| \exp\left(\frac{-i\widehat{H}t}{\hbar}\right) |\Psi(0)\rangle = \sum_k |k\rangle \exp\left(\frac{-iE_k t}{\hbar}\right) \langle k | \Psi(0) \rangle \quad (2.49)$$

Utilizando (2.38) podemos ver que

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{ikja} e^{-ikj'a} |j\rangle \exp\left(\frac{-iE_k t}{\hbar}\right) \langle j' | \Psi(0) \rangle \quad (2.50)$$

Definindo as amplitudes de Wannier  $\psi_j(t) = \langle j | \Psi(t) \rangle$  obtemos

$$\begin{aligned} \psi_j(t) &= \frac{1}{N} \sum_k \sum_{j'',j'} e^{ikj''a} e^{-ikj'a} \langle j | j'' \rangle \exp\left(\frac{-iE_k t}{\hbar}\right) \langle j' | \Psi(0) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_k \sum_{j'} e^{ikja} e^{-ikj'a} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right) \psi_{j'}(0) \end{aligned} \quad (2.51)$$

Consideremos agora dois tipos interessantes de condições iniciais:

### Delta inicial

Analisemos a condição inicial onde toda a função de onda encontra-se localizada em um único sítio ( $j_0$ ), ou seja,

$$\psi_j(0) = \delta_{j,j_0} \quad (2.52)$$

com essa distribuição inicial chegamos em

$$\begin{aligned}\psi_j(t) &= \frac{1}{N} \sum_k \sum_{j'} e^{ikja} e^{-ikj'a} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right) \delta_{j,j_0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_k e^{ikja} e^{-ikj_0a} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right)\end{aligned}\quad (2.53)$$

mas, restringindo os valores de  $k$  à primeira zona de Brillouin, podemos fazer as transformações

$$\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \quad , \quad L = Na \quad (2.54)$$

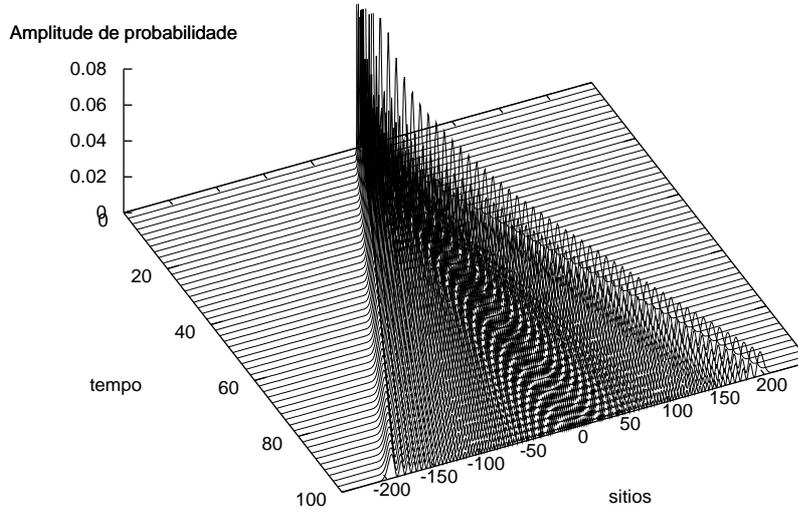
que nos levam a

$$\psi_j(t) = \frac{1}{N} \frac{Na}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{ikja} e^{-ikj_0a} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right) dk \quad (2.55)$$

fazendo a substituição de variáveis  $ka = x$  obtemos finalmente

$$\psi_j(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ix(j-j_0)} \exp\left(-\frac{2iVt}{\hbar} \cos(x)\right) dx = J_{j-j_0}\left(-\frac{2Vt}{\hbar}\right) e^{-ij\frac{\pi}{2}} \quad (2.56)$$

Ou seja, no caso de uma distribuição inicial em forma de uma delta centrada em  $j_0$ , a evolução temporal das amplitudes de Wannier da função de onda em cada sítio é representada por funções de Bessel de primeira espécie. A figura (2.1) mostra a evolução temporal das amplitudes de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$ , sendo as  $\psi_j(t)$  calculadas por (2.56), em cada sítio da rede, onde a unidade de tempo utilizada é o parâmetro adimensional  $\tau = \frac{Vt}{\hbar}$ .



**Fig. 2.1:** Evolução temporal de  $|\psi_j(t)|^2$ , dada pela equação (2.56).

### Gaussiana inicial

Para o caso em que o pacote de ondas está inicialmente distribuído como uma gaussiana de largura  $\sigma$  centrada no sítio  $j = 0$ , ou seja,

$$\psi_j(0) = C \exp\left(-\frac{(j)^2 a^2}{4\sigma^2}\right) \quad (2.57)$$

a equação (2.51) fica

$$\psi_j(t) = \frac{C}{N} \sum_k \sum_{j'} e^{ikja} e^{-ikj'a} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(j')^2 a^2}{4\sigma^2}\right) \quad (2.58)$$

sendo  $C$  uma constante de normalização. Reescrevendo a equação acima como

$$\psi_j(t) = \frac{C}{N} \sum_k e^{ikja} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right) \sum_{j'} e^{-ikj'a} \exp\left(-\frac{(j')^2 a^2}{4\sigma^2}\right) \quad (2.59)$$

notamos que o somatório em  $j'$  é a versão discreta da transformada de Fourier da função gaussiana. Fazendo  $y = j'a$  e utilizando a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iky} \exp\left(-\frac{y^2}{4\sigma^2}\right) dy = 2\sqrt{\pi}\sigma e^{-k^2\sigma^2} \quad (2.60)$$

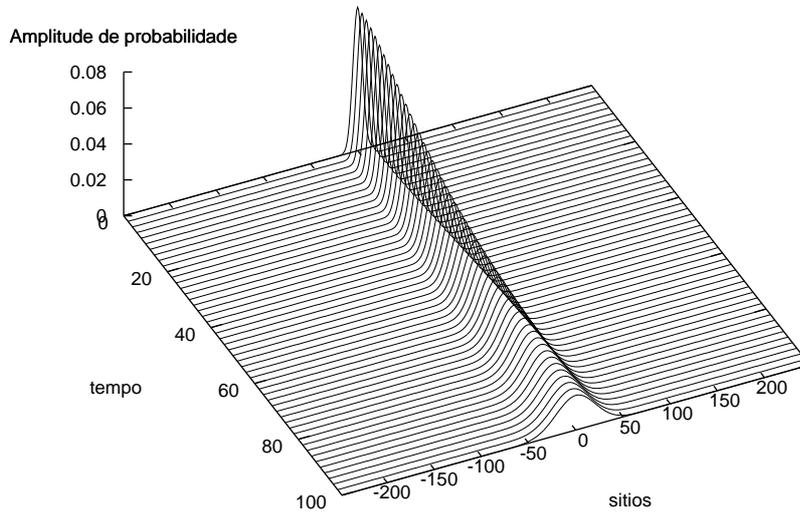
podemos escrever

$$\psi_j(t) = \frac{2\sqrt{\pi}C\sigma}{N} \sum_k e^{ikja} \exp\left(\frac{2iV \cos(ka)t}{\hbar}\right) e^{-k^2\sigma^2} \quad (2.61)$$

considerando as mesmas transformações feitas em (2.54) e fazendo novamente  $x = ka$  chegamos finalmente em

$$\psi_j(t) = \frac{C\sigma}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ijx} \exp\left(\frac{2iV \cos(x)t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x)^2\sigma^2}{a^2}\right) dx \quad (2.62)$$

A figura 2.2 mostra o gráfico da evolução de  $|\psi_t(t)|^2$ , utilizando (2.62), em nosso sistema.



**Fig. 2.2:** Evolução temporal de  $|\psi_j(t)|^2$ , dada pela equação (2.62) com  $\sigma = 5$  e  $a = 1$ .



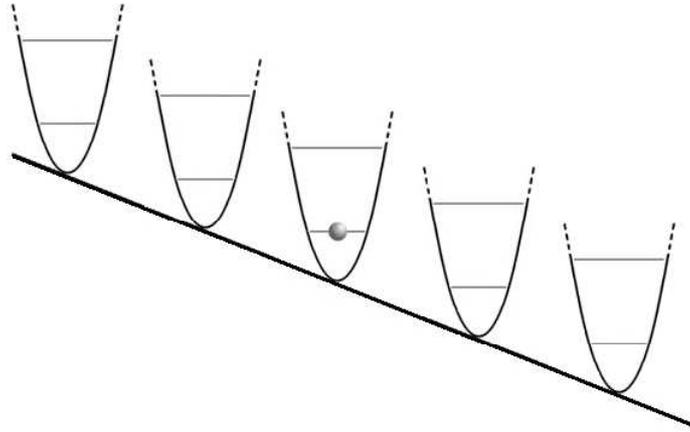
## Capítulo 3

# Campo elétrico e oscilações de Bloch

Consideremos uma partícula carregada localizada em uma rede unidimensional, representada por um potencial periódico  $V(x)$ , e sujeita a uma força externa constante, resultante de um campo elétrico externo aplicado ao longo da rede (ver figura 3.1 ). Neste caso, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + Fex \quad , \quad V(x) = V(x + a) \quad (3.1)$$

onde  $F$  é o módulo do campo elétrico externo aplicado,  $e$  é a carga da partícula e  $a$  é o parâmetro da rede. A dinâmica deste sistema, como será mostrado à seguir, apresenta oscilações da função de onda associada a partícula com um determinado período, bem conhecido na literatura [32]. Estas oscilações são chamadas *Oscilações de Bloch* (ou *Bloch-Zener*), pois foram inicialmente referidas pelo físico suíço Félix Bloch (1905-1983) [15] e posteriormente discutidas pelo físico americano Clarence Zener (1905-1993) [32].



**Fig. 3.1:** Representação esquemática do potencial numa cadeia de íons (potencial periódico), modificado por um campo elétrico de externo, que induz o aparecimento de uma "rampa", desnivelando os potenciais dos íons.

### 3.1 Descrição via modelo tight-binding

No modelo *tight-binding* unidimensional, o Hamiltoniano que descreve a dinâmica de uma partícula sujeita a um potencial periódico e a um potencial linear, que representa a aplicação de um campo elétrico externo constante, é escrito em termos de operadores de projeção como

$$H = -V \sum_{j=1}^N (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) + \sum_{j=1}^N eFaj|j\rangle\langle j| \quad (3.2)$$

sendo  $eFaj$  a versão discreta do termo de energia associado ao campo elétrico. Ao multiplicarmos este Hamiltoniano à esquerda pelo estado de momentum  $|k\rangle$  e à direita pelo estado  $|k'\rangle$  obtemos

$$\langle k|H|k'\rangle = -V \sum_{j=1}^N (\langle k|j\rangle\langle j+1|k'\rangle + \langle k|j+1\rangle\langle j|k'\rangle) + \sum_{j=1}^N eFaj\langle k|j\rangle\langle j|k'\rangle \quad (3.3)$$

Como a expansão de estados de momento  $|k\rangle$  em estados de Wannier é dada por

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \sum_{j=1}^N e^{ikja} |j\rangle \quad (3.4)$$

temos que

$$\langle k|j\rangle\langle j+1|k'\rangle = \frac{a}{2\pi} \sum_{j=1}^N e^{ikaj} \langle j|j\rangle \sum_{j'=1}^N e^{ik'j'a} \langle j+1|j\rangle = \frac{a}{2\pi} e^{ik'a} e^{ija(k'-k)} \quad (3.5)$$

com o mesmo raciocínio chegamos também a

$$\langle k|j+1\rangle\langle j|k'\rangle = \frac{a}{2\pi} e^{ika} e^{ija(k'-k)} \quad (3.6)$$

ainda

$$j\langle k|j\rangle\langle j|k'\rangle = \frac{a}{2\pi} j \sum_{j'=1}^N e^{ikj'a} \langle j'|j\rangle \sum_{j''=1}^N e^{ik'j''a} \langle j|j''\rangle = \frac{a}{2\pi} j e^{ija(k'-k)} \quad (3.7)$$

o que nos leva a

$$\begin{aligned} \langle k|H|k'\rangle &= -V \left( \sum_{j=1}^N \frac{a}{2\pi} e^{ik'a} e^{ija(k'-k)} + \sum_{j=1}^N \frac{a}{2\pi} e^{-ika} e^{ija(k'-k)} \right) + Fe \frac{a^2}{2\pi} \sum_{j=1}^N j e^{ija(k'-k)} \\ &= -Va\delta_{k',k}(e^{ik'a} + e^{-ika}) + ieFa\delta_{k',k} \frac{d}{dk'} = a\delta_{k,k'} H(k) \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$H(k) = -2V \cos(ka) + iFe \frac{d}{dk} \quad (3.9)$$

Os autoestados do Hamiltoniano acima,  $\Psi(k) = \langle k|\Psi\rangle$ , podem ser calculados pela equação de Schrödinger

$$H(k)|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (3.10)$$

de forma que temos

$$H(k)|\Psi\rangle = -2V \cos(ka)\Psi(k) + iFe \frac{d\Psi(k)}{dk} = E\Psi(k). \quad (3.11)$$

Resolvendo esta equação por separação de variáveis e considerando a normalização da função de onda dentro da primeira zona de Brillouin,  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ , chegamos a

$$\Psi(k) = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \exp\left(-\frac{i}{Fe} \left(Ek + \frac{2V}{a} \sin(ka)\right)\right) \quad (3.12)$$

Considerando esta restrição de  $k$  à primeira zona de Brillouin, ou seja, fazendo  $\Psi(k+b) = \Psi(k)$ , onde  $b = \frac{2\pi}{a}$ , obtemos os valores para as autoenergias

$$E_m = m eFa \quad , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.13)$$

de forma que os autoestados ficam

$$\Psi_m(k) = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \exp\left(-i \left(mak + \frac{2V}{eFa} \sin(ka)\right)\right), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.14)$$

Na representação de estados de Wannier temos

$$\begin{aligned}
 \Psi_m(j) &= \langle j | \Psi_m \rangle = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \langle j | k \rangle \langle k | \Psi_m \rangle dk \\
 &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-i\left(mak + \frac{2V}{eFa} \sin(ka)\right)\right) \sum_{j'=1}^N e^{ikj'a} \langle j | j' \rangle dk \\
 &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-i\left(eka(m-j) + \frac{2V}{eFa} \sin(ka)\right)\right) dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left(i\left(x(j-m) - \frac{2V}{eFa} \sin(x)\right)\right) dx = J_{j-m}(\gamma)
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

sendo  $J_i(x)$  a função de Bessel de ordem  $i$ , e  $\gamma = \frac{2V}{eFa}$ . Na base de Wannier, o propagador temporal pode ser escrito como

$$K_{jj'}(t) = \langle j | U(t) | j' \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle j | \Psi_l \rangle e^{-\frac{iE_l t}{\hbar}} \langle \Psi_l | j' \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_{j-l}(\gamma) e^{-\frac{iE_l t}{\hbar}} J_{j'-l}(\gamma). \tag{3.16}$$

O teorema de adição para as funções de Bessel de ordem inteira diz que [33]

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(z) J_{k-p}(z) e^{ikx} = J_p(2z \sin(x/2)) e^{ip(\pi-x)/2} \tag{3.17}$$

o que nos leva a

$$K_{jj'}(t) = J_{j-j'}\left(2\gamma \sin\left(\frac{eFat}{2\hbar}\right)\right) e^{\frac{i}{2}(j-j')\left(\pi - \frac{eFat}{\hbar}\right)} e^{i\frac{j'eFat}{\hbar}} \tag{3.18}$$

## 3.2 Dependência das condições iniciais

Consideremos agora dois casos particulares muito interessantes, onde a função de onda tem como condições iniciais uma delta localizada no sítio central e uma gaussiana centrada neste mesmo sítio.

A dinâmica de nosso sistema é dada pela evolução temporal da função de onda

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \psi_j(t) |j\rangle \tag{3.19}$$

onde as  $\psi_j$  são as amplitudes de Wannier e estão associadas a probabilidade de encontrar a partícula no sítio  $j$ , assim sendo, a restrição  $\sum_j |\psi_j|^2 = 1$  se faz necessária.

### Delta inicial

No caso em que a função de onda está inicialmente localizada de forma integral no sítio central temos

$$\psi_j(0) = \delta_{j,0} \quad (3.20)$$

e a evolução das amplitudes no tempo, conseqüentemente, é dada por

$$\begin{aligned} \psi_j(t) = \langle j | \Psi(t) \rangle &= \langle j | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \Psi(0) \rangle = \langle j | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \left( \sum_m |\Psi_m\rangle \langle \Psi_m| \right) | \Psi(0) \rangle = \\ &= \sum_m \langle j | \Psi_m \rangle e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} \langle \Psi_m | \Psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde foi usada a relação de clausura, já que os autoestados do Hamiltoniano,  $|\Psi_m\rangle$ , são uma base completa do espaço de Hilbert correspondente. Vendo que

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_j \psi_j(0) |j\rangle = \sum_j \delta_{j,0} |j\rangle = |0\rangle \quad (3.22)$$

podemos escrever, usando (3.18)

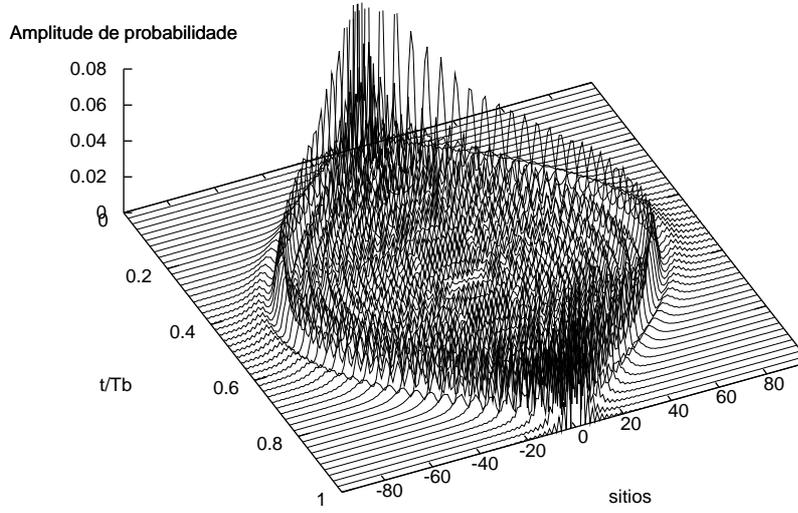
$$\psi_j(t) = \sum_m \langle j | \Psi_m \rangle e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} \langle \Psi_m | 0 \rangle = K_{j0} = J_j \left( 2\gamma \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \right) e^{\frac{i}{2}j(\pi - \frac{eFat}{\hbar})} \quad (3.23)$$

(ver figura 3.2). Como o espectro de energia, dado por (3.13), tem espaçamento equidistante  $\Delta E = eFa$ , o propagador é periódico no tempo [33], com período igual a

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{eFa} \quad (3.24)$$

conseqüentemente, a dinâmica de qualquer pacote de ondas construído com  $\psi_j(t)$  também é periódica no tempo, com o mesmo período. A partir de (3.23) pode-se mostrar também que o pacote de ondas se estreita e se alarga na rede, ocupando uma região dada por [16]

$$|j| < \left| 2\gamma \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \right|. \quad (3.25)$$



**Fig. 3.2:** Evolução temporal de  $|\psi_j(t)|^2$ , dada pela equação (3.23), para  $\gamma = 40$ . Observa-se uma oscilação de Bloch com período  $T_B$ .

### Gaussiana inicial

Ao considerarmos a distribuição inicial do pacote como uma gaussiana centrada no sítio  $j = 0$ , ou seja,

$$\psi_j(0) = C \exp\left(-\frac{j^2 a^2}{4\sigma^2}\right) \quad (3.26)$$

onde  $C$  é uma constante de normalização e  $\sigma$  é o desvio padrão da distribuição. Se, para este caso, considerarmos que  $\sigma^2 \gg a^2$ , a evolução temporal das amplitudes de Wannier pode ser aproximada por (ver detalhes em [33])

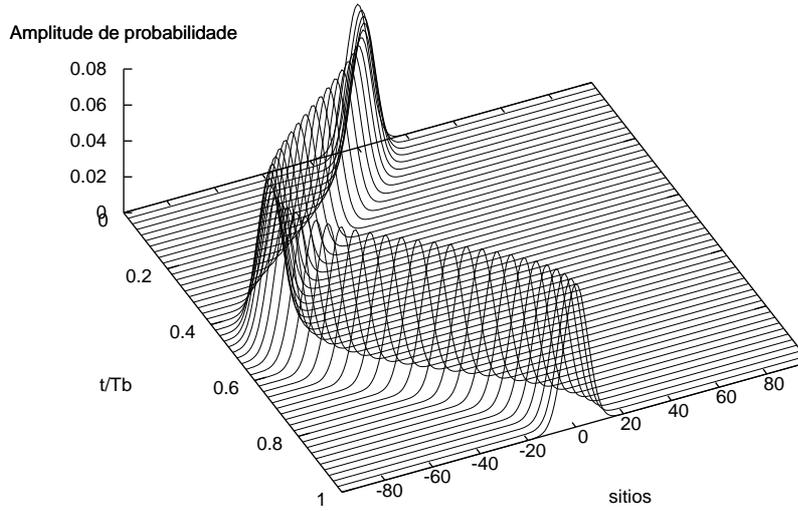
$$\psi_j(t) \approx C \exp\left(-i\Phi(t) - i\frac{j e F a t}{\hbar} - \frac{a^2}{4\sigma^2}(j - j(t))^2\right) \quad (3.27)$$

sendo  $\Phi(t)$  uma fase dinâmica dada por

$$\Phi(t) = -2\gamma \sin\left(\frac{e F a t}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{e F a t}{2\hbar}\right) \quad (3.28)$$

e  $j(t)$  representando o centro da distribuição, que executa uma oscilação com período  $T_B$ , dado por (ver figura 3.3).

$$j(t) = -2\gamma \sin^2\left(\frac{e F a t}{2\hbar}\right) \quad (3.29)$$



**Fig. 3.3:** Evolução temporal de  $|\psi_j(t)|^2$ , dada pela equação (3.27), para  $\gamma = 40$  e  $a^2/\sigma^2 = 0.04$ . Neste caso, o centróide do pacote de ondas realiza uma oscilação de Bloch, de acordo com (3.29).

### 3.3 Valores esperados de posição

A fim de caracterizar de forma ainda mais completa a dinâmica das oscilações de Bloch, analisemos a dependência temporal dos valores esperados de posição e de momentum da função de onda, bem como de suas respectivas variâncias. O Hamiltoniano tight-binding (3.9) pode ser escrito como

$$\widehat{H} = -2V \cos(\widehat{k}a) + eF\widehat{x} \quad (3.30)$$

onde  $\widehat{k}$  e  $\widehat{x} = i\frac{d}{dk}$  são operadores unitários que satisfazem a regra de comutação  $[\widehat{x}, \widehat{k}] = i$ . Por simplicidade, neste caso trabalharemos com um conjunto um pouco diferente de operadores unitários, definidos por [34]

$$\begin{aligned} \widehat{K} &= e^{-i\widehat{k}a} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |j\rangle\langle j+1| \\ \widehat{K}^\dagger &= e^{i\widehat{k}a} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |j+1\rangle\langle j| \end{aligned}$$

$$\widehat{N} = \widehat{x}/a = \sum_{j=-\infty}^{\infty} j|j\rangle\langle j| \quad (3.31)$$

de forma que

$$\widehat{K}|j\rangle = |j-1\rangle \quad , \quad \widehat{K}^\dagger|j\rangle = |j+1\rangle \quad , \quad \widehat{N}|j\rangle = j|j\rangle \quad (3.32)$$

e, ainda, as seguintes relações de comutação são obedecidas:

$$[\widehat{K}, \widehat{N}] = \widehat{K} \quad , \quad [\widehat{K}^\dagger, \widehat{N}] = -\widehat{K}^\dagger \quad , \quad [\widehat{K}, \widehat{K}^\dagger] = 0 \quad (3.33)$$

Utilizando os operadores definidos em (3.31), o Hamiltoniano (3.30) fica dado por

$$\widehat{H} = -V(\widehat{K} + \widehat{K}^\dagger) + eFa\widehat{N}. \quad (3.34)$$

A evolução temporal do operador  $\widehat{K}$  é dada pela equação de Heisenberg

$$\frac{d\widehat{K}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}(t), \widehat{K}(t)] = \frac{ieFa}{\hbar} [\widehat{N}(t), \widehat{K}(t)] = -\frac{ieFa}{\hbar} \widehat{K}(t) \quad (3.35)$$

que pode ser facilmente resolvida em nosso caso, quando temos um campo constante  $F$

$$\widehat{K}(t) = e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} \widehat{K} \quad (3.36)$$

( $\widehat{K}(0) = \widehat{K}$ ). Utilizando  $\widehat{K}^\dagger(t) = e^{i\frac{eFat}{\hbar}} \widehat{K}^\dagger$  obtemos

$$\frac{d\widehat{N}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}(t), \widehat{N}(t)] = -\frac{iV}{\hbar} [\widehat{K}(t) + \widehat{K}^\dagger(t), \widehat{N}(t)] = -\frac{iV}{\hbar} (\widehat{K}(t) - \widehat{K}^\dagger(t)) \quad (3.37)$$

integrando a equação para  $\widehat{N}(t)$  chegamos a

$$\widehat{N}(t) = \widehat{N} + \frac{V}{eFa} \left( (e^{i\frac{eFat}{\hbar}} - 1) \widehat{K} + (e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} - 1) \widehat{K}^\dagger \right) \quad (3.38)$$

( $\widehat{N}(0) = \widehat{N}$ ). Calculemos agora os valores esperados destes operadores. O valor esperado do operador  $\widehat{K}(t)$  é dado por

$$\langle \widehat{K}(t) \rangle = \langle \Psi | \widehat{K}(t) | \Psi \rangle = e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} \langle \widehat{K} \rangle = e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} |K| e^{iak_0} \quad (3.39)$$

onde, de (3.31)

$$\langle \widehat{K} \rangle = |K| e^{iak_0} = \sum_j \psi_{j-1}^* \psi_j \quad (3.40)$$

já o valor esperado do operador  $\widehat{N}(t)$  é

$$\begin{aligned}
 \langle \widehat{N}(t) \rangle &= \langle \Psi | \widehat{N}(t) | \Psi \rangle = \langle \widehat{N} \rangle + \frac{V}{eFa} \left( (e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} - 1) \langle \widehat{K} \rangle + (e^{i\frac{eFat}{\hbar}} - 1) \langle \widehat{K}^\dagger \rangle \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{V}{eFa} |K| \left( (e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} - 1) e^{iak_0} + (e^{i\frac{eFat}{\hbar}} - 1) e^{-iak_0} \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{V}{eFa} |K| \left( e^{i(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0)} + e^{-i(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0)} - (e^{iak_0} + e^{-iak_0}) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{V}{eFa} |K| \left( 2 \cos \left( \frac{eFat}{\hbar} - ak_0 \right) - 2 \cos(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \gamma |K| \left( \cos \left( \frac{eFat}{\hbar} - ak_0 \right) - \cos(ak_0) \right) \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

Utilizando algumas propriedades de funções trigonométricas podemos escrever a expressão acima de uma forma mais conveniente

$$\begin{aligned}
 \langle \widehat{N}(t) \rangle &= \langle \widehat{N} \rangle + \gamma |K| \left( \cos \left( \frac{eFat}{\hbar} - ak_0 \right) - \cos(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \gamma |K| \left( \cos \left( \frac{eFat}{\hbar} \right) \cos(ak_0) + \sin \left( \frac{eFat}{\hbar} \right) \sin(ak_0) - \cos(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \gamma |K| \left( \cos(ak_0) \left( \cos \left( \frac{eFat}{\hbar} \right) - 1 \right) + \sin \left( \frac{eFat}{\hbar} \right) \sin(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + \gamma |K| \left( \cos(ak_0) \left( -2 \sin^2 \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \right) + \sin \left( \frac{eFat}{\hbar} \right) \sin(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle + 2\gamma |K| \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \left( -\sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \cos(ak_0) + \cos \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \sin(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle - 2\gamma |K| \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \left( \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \cos(ak_0) - \cos \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \sin(ak_0) \right) \\
 &= \langle \widehat{N} \rangle - 2\gamma |K| \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right) \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

permitindo-nos perceber que a última igualdade acima

$$\langle \widehat{N}(t) \rangle = \langle \widehat{N} \rangle - 2\gamma |K| \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right) \quad (3.43)$$

corresponde a expressão encontrada para a dinâmica do centro da distribuição gaussiana (3.29) multiplicada por  $|K|$ , quando  $\langle \widehat{N} \rangle = 0$  e  $k_0 = 0$ .

Da mesma forma podemos calcular expressões para  $\langle \widehat{N}^2(t) \rangle$  e  $\langle \widehat{K}^2(t) \rangle$ . Introduzindo as definições

$$\begin{aligned}
 L &= |L| e^{i\nu} = \sum_j \psi_{j-2}^* \psi_j \\
 J &= |J| e^{i\mu} = \sum_j (j-1) \psi_{j-1}^* \psi_j \quad (3.44)
 \end{aligned}$$

podemos encontrar, após alguma álgebra, as expressões para os valores esperados [16]

$$\langle \widehat{K}^2(t) \rangle = L e^{\frac{2ieFat}{\hbar}} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} \langle \widehat{N}^2(t) \rangle &= \langle \widehat{N}^2 \rangle + 2\gamma^2 \sin^2 \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \left( 1 - |L| \cos \left( \frac{eFat}{\hbar} - \nu \right) \right) \\ &\quad + 2\gamma |J| \sin \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \sin \left( \mu - \frac{eFat}{2\hbar} \right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Novamente, consideremos as duas configurações interessantes de distribuições iniciais de nosso pacote de onda utilizadas anteriormente. Primeiro, analisemos a dinâmica do pacote de onda quando inicialmente apenas um sítio está ocupado e as amplitudes de Wannier são dadas por (3.20). Neste caso temos

$$\begin{aligned} \langle \widehat{N} \rangle &= \sum_n \sum_{j,j'} n \psi_j \psi_{j'}^* \langle j'|n \rangle \langle n|j \rangle = \sum_n \sum_{j,j'} n \delta_{j,0} \delta_{j',0} \langle j'|n \rangle \langle n|j \rangle \\ &= \sum_n n \langle 0|n \rangle \langle n|0 \rangle = \sum_n n \delta_{n,0}^2 = \sum_n n \delta_{n,0} = 0 \end{aligned} \quad (3.47)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \widehat{K} \rangle &= \sum_n \sum_{j,j'} \psi_j \psi_{j'}^* \langle j'|n \rangle \langle n+1|j \rangle = \sum_n \sum_{j,j'} \delta_{j,0} \delta_{j',0} \langle j'|n \rangle \langle n+1|j \rangle \\ &= \sum_n \langle 0|n \rangle \langle n+1|0 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.48)$$

com isso, usando (3.43), chegamos a

$$\langle \widehat{N}(t) \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \widehat{N}(t) \rangle^2 = 0 \quad (3.49)$$

Para este caso temos ainda

$$\begin{aligned} \langle \widehat{N}^2 \rangle &= \sum_{n,n'} nn' \sum_{j,j'} \psi_j \psi_{j'}^* \langle j'|n \rangle \langle n|n' \rangle \langle n'|j \rangle = \sum_n n^2 \sum_{j,j'} \delta_{j,0} \delta_{j',0} \langle j'|n \rangle \langle n|j \rangle \\ &= \sum_n n^2 \langle 0|n \rangle \langle n|0 \rangle = \sum_n n^2 \delta_{n,0} = 0 \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} L &= \sum_j \psi_{j-2}^* \psi_j = \sum_j \delta_{j-2,0} \delta_{j,0} = 0 \\ J &= \sum_j (j-1) \psi_{j-1}^* \psi_j = \sum_j (j-1) \delta_{j-1,0} \delta_{j,0} = 0 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Assim, de (3.46), obtemos

$$\langle \widehat{N}^2(t) \rangle = 2\gamma^2 \sin^2 \left( \frac{eFat}{2\hbar} \right) \quad (3.52)$$

Utilizando os valores de (3.49) e (3.52) temos

$$\Delta\widehat{N}(t) = \left( \langle \widehat{N}^2(t) \rangle - \langle \widehat{N}(t) \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\langle \widehat{N}^2(t) \rangle} = \sqrt{2\gamma} \left| \sin \left( \frac{eF at}{2\hbar} \right) \right| \quad (3.53)$$

Estes resultados nos mostram que, para a condição inicial (3.20) o pacote de ondas evolui no tempo de forma a manter fixo o ponto central da distribuição (3.49), mas apresenta uma respiração com período igual a  $T_B$ , observada pela evolução temporal do desvio quadrático médio, dado por (3.53), que está em perfeito acordo com a expressão (3.25). Esta respiração caracteriza uma Oscilação de Bloch no sistema.

Consideremos agora o pacote inicialmente distribuído como uma gaussiana, de forma que as amplitudes de Wannier são dadas por (3.26). Levando em consideração a restrição  $\sigma^2 \gg a^2$ , podemos substituir as somas em (3.40) e (3.44) por integrais, o que nos leva a [16]

$$K \approx e^{-\frac{a^2}{8\sigma^2} + iak_0}, \quad L \approx e^{-\frac{a^2}{2\sigma^2} + 2iak_0}, \quad J \approx 0 \quad (3.54)$$

de forma que temos  $|K| \approx |L| \approx 1$  e  $\nu \approx 2ak_0$ . Com isso, o valor esperado (3.43) fica

$$\langle \widehat{N}(t) \rangle = \langle \widehat{N} \rangle - 2\gamma \sin \left( \frac{eF at}{2\hbar} \right) \sin \left( \frac{eF at}{2\hbar} - ak_0 \right) \quad (3.55)$$

mas

$$\langle \widehat{N} \rangle = \sum_n \sum_{j,j'} n \psi_j \psi_{j'}^* \langle j'|n \rangle \langle n|j \rangle = \sum_n n |\psi_n|^2 = \sum_n n |C|^2 e^{\frac{n^2 a^2}{2\sigma^2}} = 0 \quad (3.56)$$

pois  $-\infty < n < \infty$  e a gaussiana tem uma distribuição simétrica com relação a  $n = 0$ . Assim temos

$$\langle \widehat{N}(t) \rangle = -2\gamma \sin \left( \frac{eF at}{2\hbar} \right) \sin \left( \frac{eF at}{2\hbar} - ak_0 \right) \quad (3.57)$$

Já (3.46) fica

$$\begin{aligned} \langle \widehat{N}^2(t) \rangle &= \langle \widehat{N}^2 \rangle + 2\gamma^2 \sin^2 \left( \frac{eF at}{2\hbar} \right) \left( 1 - \cos \left( \frac{eF at}{\hbar} - 2ak_0 \right) \right) \\ &= \langle \widehat{N}^2 \rangle + 4\gamma^2 \sin^2 \left( \frac{eF at}{2\hbar} \right) \sin^2 \left( \frac{eF at}{2\hbar} - ak_0 \right) \\ &= \langle \widehat{N}^2 \rangle - \langle \widehat{N}(t) \rangle^2 \end{aligned} \quad (3.58)$$

O que nos leva a

$$\Delta\widehat{N}(t) = \langle \widehat{N}^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \quad (3.59)$$

Ou seja, para uma distribuição inicial dada por (3.26), a largura da gaussiana (3.59) permanece praticamente inalterada no tempo, enquanto que o ponto central da distribuição (3.57) oscila com um período igual ao período de Bloch  $T_B$ , caracterizando uma oscilação

de Bloch um pouco diferente do caso considerado anteriormente. Este contraste pode ser observado nos gráficos 3.2 e 3.3.

Em suma, os cálculos analíticos desenvolvidos nesse capítulo mostram que as oscilações de Bloch apresentam comportamento bastante diferente, de acordo com as duas condições iniciais propostas: para a distribuição inicial tipo delta (3.2), o centróide do pacote de ondas permanece fixo, e a largura oscila com período  $T_B$ ; já para a distribuição inicial gaussiana (3.3), o centroide oscila com período  $T_B$  e a largura do pacote permanece aproximadamente constante.

## Capítulo 4

# Desordem

Nesta dissertação, até aqui, propusemos a resolução da equação de Schrödinger não linear com campo elétrico de externo aplicado, considerando uma rede unidimensional ideal, ou seja, sempre supomos que todos os sítios são idênticos e a rede possui total simetria de translação. Porém, sabemos que, em geral, os sistemas físicos reais não apresentam a simetria que todo físico teórico desejaria que eles possuísem.

Na física de materiais, por exemplo, a maioria das teorias que tentam explicar propriedades de sólidos utilizam modelos simplificados, que consideram o arranjo atômico deste material como sendo perfeitamente regular, supondo uma rede onde todos os sítios, que representam cada átomo, são idênticos e igualmente espaçados. Estes modelos são obviamente aproximados, pois a grande maioria dos materiais reais apresentam falhas nesta simetria, causadas por impurezas, dopagem, vacâncias, etc. Quando o sistema apresenta este tipo de irregularidade, dizemos que se trata de um sistema desordenado. Se esta desordem apresentada pelo sistema é pequena, a dinâmica eletrônica não é significativamente afetada, e podemos utilizar teoria de perturbação para solucionar este problema. Mas, conforme a intensidade desta irregularidade aumenta, fenômenos interessantes e importantes passam a ser observados, como por exemplo a localização eletrônica, que será discutida a seguir.

### 4.1 Localização em sistemas eletrônicos desordenados

Para considerarmos os efeitos da desordem em um sistema físico, consideramos um elétron localizado em uma rede cristalina, caracterizada por um potencial periódico, como descrito na figura 4.1(a). Como sabemos, uma partícula sujeita a um potencial desta natureza apresenta uma função de onda de Bloch que, numa expansão em orbitais atômicos, pode

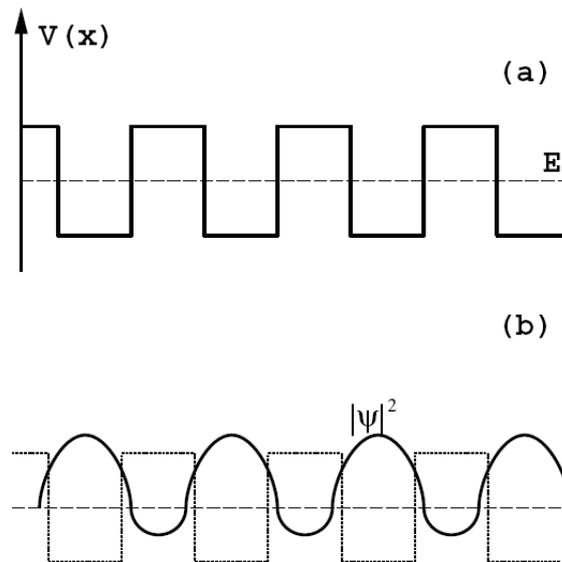
ser descrita por

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_A(\vec{r} - \vec{R}) \quad (4.1)$$

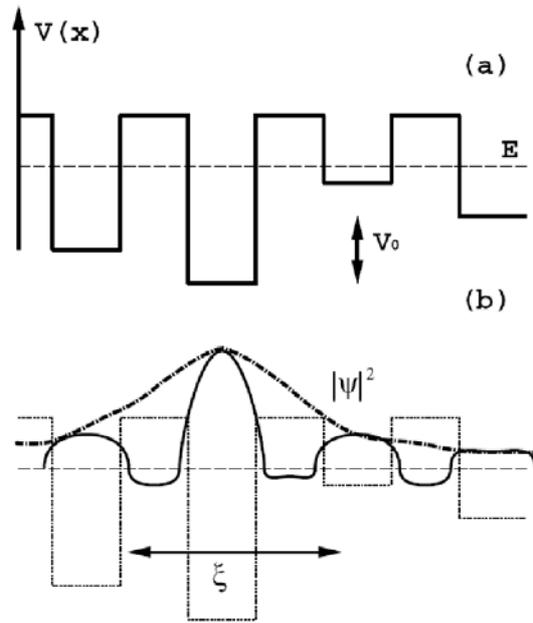
onde  $\psi_A(\vec{r} - \vec{R})$  são funções de onda atômicas e  $\vec{R}$  é um vetor da rede em questão. Esta solução é claramente estendida, como pode ser visto na figura 4.1(b). Porém, se considerarmos um potencial desordenado, que flutua em torno de um valor médio  $\bar{V}$  com variância  $V_0$  (figura 4.2(a)), a função de onda eletrônica resultante passa a ser dada por [35]

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{e^{-r/\xi}}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_A(\vec{r} - \vec{R}), \quad (4.2)$$

ou seja, o pacote de ondas apresenta localização na rede em torno dos sítios com menor energia. O parâmetro  $\xi$  modela o grau de localização da função de onda, como pode ser visto na figura 4.2(b).



**Fig. 4.1:** (a) Representação esquemática de um potencial periódico unidimensional  $V(x)$ , onde se encontra uma partícula com energia  $E$ . (b) Representação do módulo quadrado da função de onda da partícula neste potencial.



**Fig. 4.2:** (a) Representação esquemática de um potencial aperiódico unidimensional  $V(x)$ , onde se encontra uma partícula com energia  $E$ . (b) Representação da localização da função de onda da partícula neste potencial.

Se considerarmos o limite tight-binding, o Hamiltoniano que representa um elétron em uma rede desordenada unidimensional é dado por

$$\widehat{H} = -V \sum_{j=1}^N (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) + \sum_{j=1}^N \varepsilon_j |j\rangle\langle j|. \quad (4.3)$$

Aqui,  $V$  é o parâmetro de Hopping e  $\varepsilon_j$  é a energia de base em cada sítio da rede, cuja distribuição irregular caracteriza a desordem.

A fim de ilustrar a existência de estados localizados em sistemas desordenados, utilizamos nossa rede acima para representar uma molécula diatômica, ou seja, consideremos uma rede com apenas dois sítios (cada sítio representa um átomo) e condição de contorno periódica, de forma que o Hamiltoniano (4.3) fica

$$\widehat{H}_{MD} = -V(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) + \varepsilon_1|1\rangle\langle 1| + \varepsilon_2|2\rangle\langle 2|. \quad (4.4)$$

Este problema pode ser resolvido facilmente se construímos novos estados ortonormais como combinações lineares dos estados  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$  da seguinte forma:

$$|A\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$$

$$|B\rangle = \alpha|2\rangle - \beta|1\rangle \quad (4.5)$$

de forma que os estados localizados em cada sítio podem ser reescritos em termos dos novos estados como

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \alpha|A\rangle - \beta|B\rangle \\ |2\rangle &= \beta|A\rangle + \alpha|B\rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

Substituindo estes vetores de estado na expressão do Hamiltoniano (4.4) obtemos

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{MD} &= -V [2\alpha\beta (|A\rangle\langle A| - |B\rangle\langle B|)] \\ &\quad -V [\alpha^2 (|A\rangle\langle B| + |B\rangle\langle A|) - \beta^2 (|A\rangle\langle B| + |B\rangle\langle A|)] \\ &\quad +\varepsilon_1 [\alpha^2|A\rangle\langle A| - \alpha\beta (|A\rangle\langle B| + |B\rangle\langle A|) + \beta^2|B\rangle\langle B|] \\ &\quad +\varepsilon_2 [\beta^2|A\rangle\langle A| + \alpha\beta (|A\rangle\langle B| + |B\rangle\langle A|) + \alpha^2|B\rangle\langle B|] \end{aligned} \quad (4.7)$$

Para que este Hamiltoniano seja diagonalizado nesta nova base, ou seja, para que tenhamos

$$\widehat{H}_{MD} = E_A|A\rangle\langle A| + E_B|B\rangle\langle B|, \quad (4.8)$$

escolhemos  $\alpha$  e  $\beta$  de tal forma que a soma dos coeficientes que multiplicam  $|A\rangle\langle B|$  e  $|B\rangle\langle A|$  seja nula. Esta condição, em ambos os casos, nos leva a

$$V\alpha^2 - V\beta^2 - (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\alpha\beta = V\alpha^2 - V\beta^2 - \Delta\varepsilon\alpha\beta = 0 \quad (4.9)$$

sendo  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$  a diferença entre as energias de base nos dois átomos considerados. Resolvendo esta equação obtemos<sup>1</sup>

$$\alpha = \beta \left( \frac{\Delta\varepsilon}{V} + \sqrt{\frac{(\Delta\varepsilon)^2}{4V^2} + 1} \right) \quad (4.10)$$

Os valores de  $\alpha$  e  $\beta$  podem ser obtidos independentemente utilizando-se (4.10) em conjunto com a condição de normalização

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \quad (4.11)$$

Desta forma obtemos

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{C}{\sqrt{1+C^2}} \\ \beta &= \frac{1}{\sqrt{1+C^2}} \end{aligned} \quad (4.12)$$

---

<sup>1</sup> Consideramos apenas a solução com sinal positivo da equação de segundo grau apresentada.

onde

$$C \equiv \left( \frac{\Delta\varepsilon}{V} + \sqrt{\frac{(\Delta\varepsilon)^2}{4V^2} + 1} \right) \quad (4.13)$$

Substituindo estes valores na expressão do Hamiltoniano (4.7), obtemos

$$\widehat{H}_{MD} = E_A|A\rangle\langle A| + E_B|B\rangle\langle B| \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} E_A &= \frac{-2VC + \varepsilon_1 C^2 + \varepsilon_2}{1 + C^2} \\ E_B &= \frac{2VC + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 C^2}{1 + C^2} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Façamos agora uma análise física dos resultados obtidos. Se consideramos o limite ordenado, ou seja, se as energias dos dois sítios são iguais ( $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ ), podemos ver de (4.10) e (4.11) que

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (4.16)$$

e os autoestados descritos em (4.5) ficam

$$\begin{aligned} |A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \\ |B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Aqui, podemos ver que ambos os autoestados são deslocalizados, pois em ambos a probabilidade de a partícula estar no sítio  $|1\rangle$  ou  $|2\rangle$  é a mesma. Agora, consideremos o limite fortemente desordenado, representado aqui por uma grande diferença entre as energias de base nos dois sítios, sendo esta diferença significativamente maior do que  $V$  ( $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1 \implies \Delta\varepsilon \gg V$ ). Utilizando esta condição em (4.10), obtemos

$$\frac{\alpha}{\beta} \approx \frac{3\Delta\varepsilon}{2V} \gg 1 \quad (4.18)$$

de forma que os autoestados dados por (4.5) passam a ser

$$\begin{aligned} |A\rangle &\approx |1\rangle \\ |B\rangle &\approx |2\rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

Desta forma, observando que cada autoestado está localizado em um sítio da rede, constatamos que a introdução de um alto grau de desordem neste sistema acaba localizando os autoestados do Hamiltoniano que o representa.

A localização observada neste limite fica evidente se consideramos o fato de que, conforme aumentamos o valor da razão  $\Delta\varepsilon/V$  a partir de zero, a expressão dos autoestados, que inicialmente era dada por (4.17) e estava espalhada igualmente entre os sítios, passa a ter seus autoestados cada vez mais fixos em um dos sítios, como mostra (4.19). Este raciocínio nos leva a crer que, para uma dada energia eletrônica, existe um valor limite de  $\Delta\varepsilon/V$ , sendo que para qualquer valor desta razão que seja superior a este limite, o sistema é dito localizado. Os resultados obtidos aqui, para uma rede desordenada de dois sítios, representam consideravelmente bem o que acontece em uma rede unidimensional de muitos (ou até infinitos) sítios.

## 4.2 Modelo de Anderson

Em 1958, o físico norte americano Philip W. Anderson publicou um artigo sugerindo a possibilidade de localização eletrônica em um semicondutor, a partir de um certo grau de desordem gerada por defeitos ou impurezas no sistema [36]. Anderson mostrou que, em uma rede unidimensional, infinita e desordenada, um pacote de ondas é localizado para qualquer amplitude de desordem diferente de zero. Nesse trabalho, a inserção da desordem no sistema foi feita através da distribuição aleatória de energias em cada sítio da rede (com amplitudes entre  $-W/2$  e  $W/2$ ). Em homenagem ao trabalho precursor publicado, este efeito de localização por desordem aleatória passou a ser chamado de *localização de Anderson* [35].

O modelo sugerido por Anderson, onde a distribuição de energias de base nos sítios é feita aleatoriamente, é a forma mais comum e mais estudada de desordem. Diversos trabalhos foram publicados sobre localização de Anderson, e muitos resultados importantes foram obtidos. Dentre estes resultados, podemos citar a propriedade de que, em um sistema unidimensional finito, quando incrementamos desde zero a amplitude da desordem (quando aumentamos  $W$ ) com relação ao hopping, podemos observar uma transição suave de estados estendidos para estados localizados, sendo que a região de parâmetros onde acontece esta transição depende do número de sítios da rede, de forma que, quanto maior a rede, mais próximo de  $W = 0$  acontece esta transição [37]. No limite em que temos uma rede infinita, o resultado provado por Anderson é observado, e qualquer valor para a amplitude da desordem, por menor que seja, já é capaz de localizar o pacote de ondas.

### 4.3 Modelo de Aubry-André

Muitos estudos foram feitos sobre o efeito da desordem em diversos contextos, e utilizando diferentes tipos de desordem (distribuição aleatória, rede de Fibonacci, rede de Thue-Morse,...) [3, 38, 39, 40]. Neste trabalho introduziremos desordem em nosso sistema utilizando um método conhecido na literatura, chamado modelo de Aubry-André (também conhecido como modelo de Harper) [10, 41].

O Hamiltoniano que descreve nosso sistema unidimensional discreto com desordem, descrito no modelo *tight-binding*, é dado por

$$\widehat{H} = -V \sum_{j=1}^N (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|) + \sum_{j=1}^N \varepsilon_j |j\rangle\langle j|. \quad (4.20)$$

Utilizando

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \widehat{H} |\Psi\rangle \quad (4.21)$$

$$\langle j | \Psi \rangle = \psi_j \quad (4.22)$$

obtemos a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\psi_j}{dt} = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + \varepsilon_j \psi_j \quad (4.23)$$

onde consideramos

$$\varepsilon_j = \varepsilon \cos(2\pi\mu(j - j_0)) \quad , \quad \mu = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} = 1,618033989... \quad (4.24)$$

sendo  $\varepsilon$  o parâmetro que regula a intensidade da desordem. Este termo, chamado Aubry-André, modela a desordem determinística no sistema, fazendo uma distribuição aperiódica de energia nos sítios da rede. Vemos que o período deste cosseno é dado por

$$T_\varepsilon = \frac{1}{\mu} \quad (4.25)$$

e, se considerarmos o parâmetro de rede  $a$  como sendo um inteiro,  $a = 1$  por exemplo (este valor será tomado mais adiante na análise numérica), temos que a razão entre os períodos da rede e do cosseno é dada por

$$\frac{a}{T_\varepsilon} = \mu \quad (4.26)$$

este resultado nos mostra que  $\varepsilon_j$  é uma função cujo período é incomensurável com o período da rede, já que  $\mu$  (*golden mean*) é um número irracional. Isto significa que a distribuição de energias nos sítios da rede, feita pelo termo de desordem, nunca se repete. O modelo

de Aubry-André distribui as energias de base em cada sítio de forma desordenada, porém não randômica, caracterizando assim a desordem determinística do sistema.

Em 1980, Serge Aubry e Gilles André [10], contradizendo a idéia de que em uma dimensão não pode haver estados estendidos para qualquer intensidade de desordem [42], mostraram que este modelo exibe uma transição entre estados localizados e estendidos em

$$\frac{\varepsilon}{V} = 2 \quad (4.27)$$

ou seja, para uma configuração inicial em que o pacote de ondas está localizado em uma determinada região da rede, este pacote se espalha dinamicamente quando  $\varepsilon/V < 2$ , já quando  $\varepsilon/V > 2$ , o pacote permanece localizado.

Fazendo uma análise deste sistema no espaço de momentum, podemos perceber que, escrevendo os autoestados de momentum como sendo

$$|k\rangle = L^{-\frac{1}{2}} \sum_j e^{i2\pi k\mu j} |j\rangle, \quad (4.28)$$

o Hamiltoniano (4.20) pode ser escrito na representação de momentum como [37]

$$\widehat{H} = \frac{\varepsilon}{2V} \left( - \sum_k (|k\rangle\langle k+1| + |k+1\rangle\langle k|) + \frac{4V}{\varepsilon} \sum_k \cos(2\pi\mu k) |k\rangle\langle k| \right). \quad (4.29)$$

Observa-se que as expressões do Hamiltoniano, dadas por (4.20) e (4.29), apresentam o mesmo formato quando temos  $\varepsilon/V = 2$ , ou seja, no ponto de transição, o Hamiltoniano proposto é auto-dual.

Diferentemente do comportamento observado no caso da desordem randômica, que apresenta localização de Anderson, a transição entre estados localizados e estendidos no modelo de Aubry-André é abrupta e o limiar de transição (4.27) é valido para qualquer rede suficientemente grande. Uma comparação interessante entre estes dois modelos foi publicada há alguns anos, como pode ser visto na referência [37].

## Capítulo 5

# Análise Numérica

Neste capítulo, apresentamos o método numérico utilizado para resolver nossa equação de Schrödinger não linear, que nos permite calcular a evolução temporal da função de onda em todos os sítios da rede. São apresentadas também algumas funções auxiliares, dependentes de  $\psi_j$ , que fornecem informações locais e globais sobre a forma da distribuição do pacote de ondas. Os resultados numéricos obtidos são analisados graficamente e discutidos na sequência.

### 5.1 Método de Crank-Nicholson

Para resolver nossa equação de Schrödinger não-linear discreta

$$i\hbar \frac{d\psi_j}{dt} = -V(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + (F_j + \varepsilon_j)\psi_j + U|\psi_j|^2\psi_j \quad (5.1)$$

representamos a derivada temporal do lado esquerdo da equação com a forma discreta

$$\frac{d\psi_j}{dt} \rightarrow \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} \quad (5.2)$$

de forma que o índice  $j$  representa a discretização espacial, o índice  $n$  representa a discretização temporal do sistema ( $\psi_j^n = \psi(x_j, t_n)$ ), e  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$  é independente do tempo. Com isso, a equação (5.1) pode ser representada como

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = \sum_l H_{jl}^n \psi_l^n \quad (5.3)$$

com os elementos de matriz do Hamiltoniano dados por

$$H_{jl}^n = -V(\delta_{j+1,l} + \delta_{j-1,l}) + (F_j + \varepsilon_j)\delta_{jl} + U|\psi_j^n|^2\delta_{jl}. \quad (5.4)$$

A equação (5.3) é uma forma de escrever (5.1), chamada "explícita" no tempo, e pode ser representada como uma equação matricial:

$$\Psi^{n+1} = \left( I - i \frac{\Delta t}{\hbar} H^n \right) \Psi^n \quad (5.5)$$

onde  $\Psi$  é o vetor função de onda da partícula ( $\Psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N)$ , para uma rede com  $N$  sítios),  $I$  é a matriz identidade e  $H^n$  é a matriz  $N \times N$  cujos elementos são dados por (5.4).

Existe ainda outra forma discreta que podemos utilizar para representar (5.1), chamada "implícita" no tempo, dada por<sup>1</sup>

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = \sum_l H_{jl}^n \psi_l^{n+1} \quad (5.6)$$

cuja representação vetorial é

$$\Psi^{n+1} = \left( I + i \frac{\Delta t}{\hbar} H^n \right)^{-1} \Psi^n \quad (5.7)$$

Ambas as formas, implícita e explícita, são equivalentes no limite contínuo  $\Delta t \rightarrow 0$ , pois  $(1 + \epsilon)^{-1} \approx (1 - \epsilon)$  quando  $\epsilon \rightarrow 0$ . Visando obter uma maior precisão em nossos cálculos, utilizaremos uma terceira forma discreta, conhecida como método de Crank-Nicholson [43], que consiste em fazer uma combinação dos métodos implícito e explícito, resultando em

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \sum_l H_{jl}^n (\psi_l^n + \psi_l^{n+1}) \quad (5.8)$$

ou ainda, em forma matricial

$$\begin{aligned} \Psi^{n+1} &= \Psi^n - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n (\Psi^n + \Psi^{n+1}) \\ \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \Psi^{n+1} &= \left( I - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \Psi^n \\ \Psi^{n+1} &= \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} \left( I - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \Psi^n \end{aligned} \quad (5.9)$$

Calculemos agora o módulo quadrado da função de onda

$$|\Psi^{n+1}|^2 = (\Psi^{n+1})^\dagger \Psi^{n+1}$$

---

<sup>1</sup> Aqui podemos utilizar  $H_{jl}^n$ , ao invés de  $H_{jl}^{n+1}$ , pois

$$\Delta H_{jl} = H_{jl}^{n+1} - H_{jl}^n = U \delta_{jl} (|\psi_j^{n+1}|^2 - |\psi_j^n|^2) = U (|\psi_j(t + \Delta t)|^2 - |\psi_j(t)|^2) = \mathcal{O}((\Delta t)^2)$$

$$\begin{aligned}
 &= \left( \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} \left( I - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \Psi^n \right)^\dagger \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} \left( I - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \Psi^n \\
 &= \left( I - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} \left( I - i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) |\Psi^n|^2 = |\Psi^n|^2 \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

Assim, a igualdade (5.10) nos mostra que a evolução temporal do sistema no método Crank-Nicholson conserva a norma, o que é muito importante já que queremos manter a norma da função de onda igual a um sempre em nossa rede por questões de conservação de probabilidade.

A fim de aproveitar o fato de que as matrizes envolvidas em nossos cálculos são tridiagonais, reescrevemos o vetor função de onda da equação (5.9) como sendo

$$\begin{aligned}
 \Psi^{n+1} &= \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} \left[ 2I - \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right) \right] \Psi^n \\
 &= \left[ 2 \left( I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right)^{-1} - I \right] \Psi^n \\
 &= \left( (Q^n)^{-1} - I \right) \Psi^n \\
 &= (Q^n)^{-1} \Psi^n - \Psi^n \quad (5.11)
 \end{aligned}$$

onde

$$Q^n = \frac{1}{2} \left[ I + i \frac{\Delta t}{2\hbar} H^n \right]. \quad (5.12)$$

Agora, resolvemos o sistema

$$Q^n \chi = \Psi^n \quad (5.13)$$

e fazemos nosso sistema evoluir no tempo segundo a regra de atualização

$$\Psi^{n+1} = \chi - \Psi^n \quad (5.14)$$

Como a nossa matriz  $Q$  é tridiagonal, podemos usar um algoritmo chamado método de Thomas, que consiste em resolver a equação  $Ax = b$  da seguinte forma: Inicialmente guardamos a matriz tridiagonal  $A$  de maneira compacta ("hashing")

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

Onde os  $\beta_i$  são os elementos da diagonal principal, os  $\alpha_i$  são os elementos da diagonal inferior à principal e os  $\gamma_i$  são os elementos da diagonal superior à principal. A eliminação "forward" requer apenas a modificação dos termos da diagonal principal

$$\beta'_i = \beta_i - \frac{\alpha_{i-1}}{\beta'_{i-1}} \gamma_{i-1} \quad i = 2, 3, \dots, N \quad (5.15)$$

com  $\beta'_1 = \beta_1$ . Para a substituição "backward", o vetor  $x$  é obtido por  $x_N = b_N/\beta'_N$  e pela recursão

$$x_i = \frac{b'_i - \gamma_i x_{i+1}}{\beta'_i} \quad i = N-1, N-2, \dots, 1 \quad (5.16)$$

Em nosso caso, a matriz  $A$  corresponde a matriz  $Q$  que, além de ser tridiagonal, é simétrica e os elementos fora da diagonal principal são constantes (ver (5.12) e (5.4)),  $\alpha_i = \gamma_i = -V$ . O algoritmo de Thomas foi implementado em nosso programa utilizando uma subrotina, chamada *tcge.f*, retirada da referência [44].

Neste trabalho, por simplicidade, a equação de Schrödinger não-linear resolvida numericamente é

$$i \frac{d\psi_j}{d\tau} = -(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + (F_j + \varepsilon_j)\psi_j + U|\psi_j|^2\psi_j \quad (5.17)$$

de forma que todos os resultados serão apresentados em função do tempo parametrizado  $\tau = Vt/\hbar$  (que será, por simplicidade, referido como  $t$ ) e os parâmetros  $U$ ,  $F$  e  $\varepsilon$  serão dados em unidades do hopping  $V$ .

## 5.2 Localização dinâmica

Um dos principais objetivos deste trabalho é classificar o transporte da partícula em nosso sistema da forma mais completa possível, definindo um (ou alguns) critério de localização, e tentando encontrar os valores dos parâmetros  $U$ ,  $\varepsilon$  e  $F$  que localizam a partícula sob a luz deste critério.

O nosso programa, além de calcular a evolução temporal do módulo quadrado das amplitudes de Wannier ( $|\psi_j|^2$ ) em cada sítio (resolvendo (5.1)), nos permitindo plotar gráficos espectrais tridimensionais, também calcula algumas funções auxiliares importantes que ajudam na caracterização da dinâmica do pacote de ondas. Estas funções são:

$$A(t) = |\psi_{j_0}(t)|^2 \quad (5.18)$$

que é conhecida como função de Anderson e fornece o valor da ocupação no sítio central

da rede ( $j_0$ );

$$S(t) = - \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)|^2 \ln |\psi_j(t)|^2 \quad (5.19)$$

conhecida como entropia de Shannon e, grosso modo, avalia o grau de concentração espacial da probabilidade de encontrar a partícula na rede;

$$W(t) = \left[ \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)|^4 \right]^{-1} \quad (5.20)$$

denominada função de participação de Wegner, sendo que o valor desta cresce conforme a probabilidade de ocupação se espalha espacialmente;

$$C(t) = \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)|^2 (j - j_0) \quad (5.21)$$

chamada função centróide, e fornece a evolução do ponto médio da distribuição do pacote de ondas;

$$M(t) = \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)|^2 (j - j_0)^2 \quad (5.22)$$

conhecido como *msd* (*mean square displacement*) e fornece o desvio quadrático médio da distribuição. Todas estas funções são plotadas em função do tempo adimensional ( $\tau = Vt/\hbar$ ) a fim de caracterizar melhor a dinâmica do sistema. A análise dos resultados é feita variando os parâmetros  $U$ ,  $\varepsilon$  e  $F$  em (5.1) e observando a evolução temporal da função de onda e de todas as funções auxiliares.

A localização de uma partícula pode ser entendida como o confinamento de sua função de onda em uma determinada região da rede. Um método convencional de analisar se uma partícula localiza ou não é considerar o comportamento da função de Anderson (5.18) para tempos grandes, ou seja, se temos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi_{j_0}(t)|^2 \rightarrow 0 \quad (5.23)$$

o sistema é dito estendido, caso contrário, é dito localizado. Porém, este critério apenas faz sentido para a distribuição inicial delta, assim, a fim de classificar a localização de forma mais genérica, analisaremos também o comportamento das funções de entropia de Shannon e de participação de Wegner ( (5.19) e (5.20) ) para tempos grandes. Quando temos máxima localização, ou seja, quando temos apenas um sítio populado, temos que

$$S(t) = - \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)|^2 \ln |\psi_j(t)|^2 = 0 \quad (5.24)$$

e

$$W(t) = \left[ \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)|^4 \right]^{-1} = 1 \quad (5.25)$$

Por outro lado, quando temos máxima deslocalização, todos os sítios da rede estão igualmente ocupados e temos

$$\psi_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (5.26)$$

assim, as expressões para as funções de Shannon e Wegner ficam

$$S(t) = - \sum_{j=1}^N \frac{1}{N} \ln \frac{1}{N} = \ln N \quad (5.27)$$

e

$$W(t) = \left[ \sum_{j=1}^N \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \right)^4 \right]^{-1} = N \quad (5.28)$$

Dessa forma, analisamos estas funções para tempos grandes e, se

$$\begin{aligned} S(t) &\rightarrow \ln N \\ W(t) &\rightarrow N \end{aligned} \quad (5.29)$$

o sistema é considerado estendido, caso contrário, é considerado localizado.

Outra função citada acima e comumente utilizada na análise deste tipo de sistema, o deslocamento quadrático médio (5.22) tem sua dependência temporal como sendo do tipo

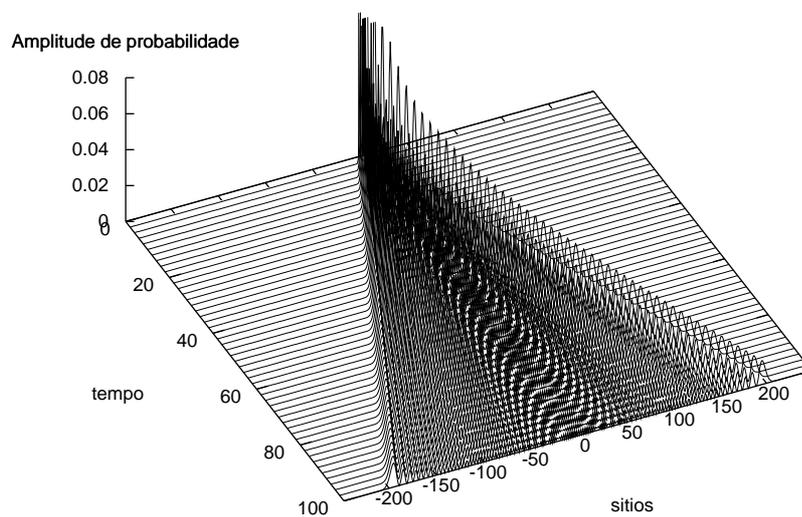
$$M(t) \propto t^\alpha, \quad (5.30)$$

de forma que a literatura em geral tende a classificar o transporte no sistema como sendo localizado para  $\alpha = 0$ , sub-difusivo para  $0 < \alpha < 1$ , difusivo para  $\alpha = 1$ , superdifusivo para  $1 < \alpha < 2$ , balístico para  $\alpha = 2$  e superbalístico para  $\alpha > 2$  [2].

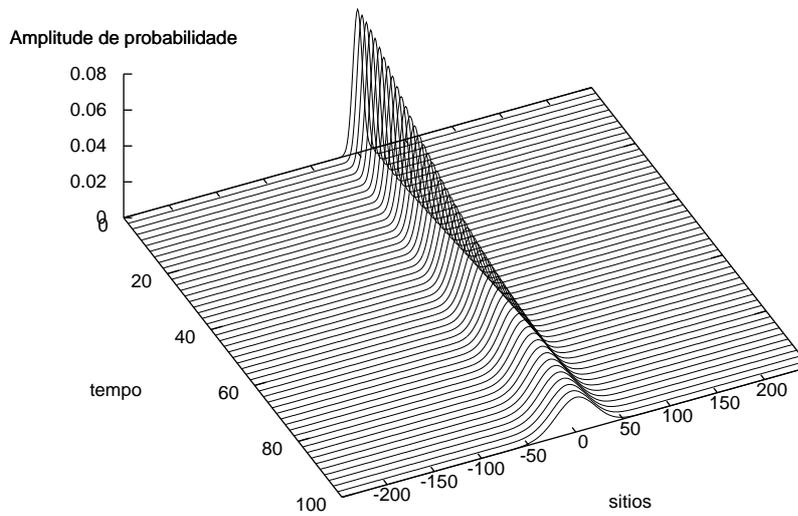
### 5.3 Resultados numéricos

Inicialmente, consideremos o caso linear, ordenado e sem campo, ou seja, consideremos  $U = \varepsilon = F = 0$ . Neste caso, a evolução temporal das amplitudes de probabilidade calculadas por nosso programa podem ser vistas na figura 5.1 para a distribuição inicial delta, e na figura 5.2 para a distribuição inicial gaussiana. Vemos claramente que o pacote de ondas se espalha na rede nos dois casos. Podemos perceber também, comparando as

figuras 5.1 e 2.1, e 5.2 e 2.2, que o resultado obtido numericamente está de acordo com o obtido analiticamente, indicando boa precisão de nosso método numérico.



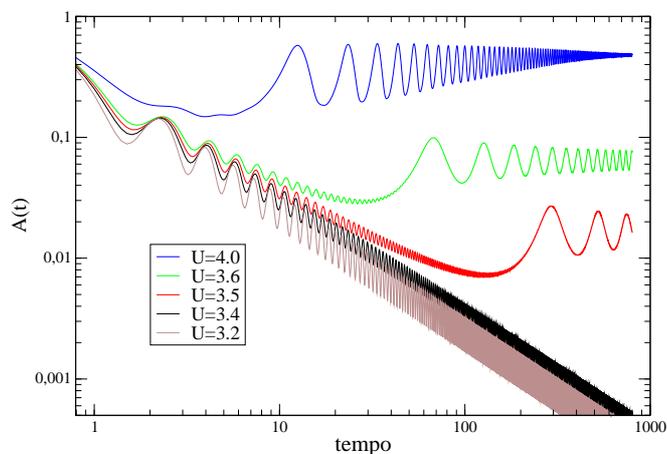
**Fig. 5.1:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = F = 0$ , considerando a distribuição inicial delta.*



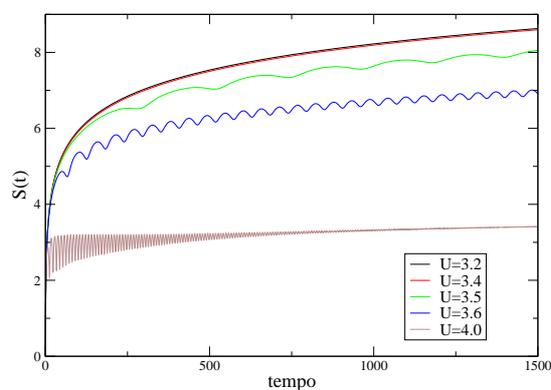
**Fig. 5.2:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = F = 0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

### 5.3.1 Correlação

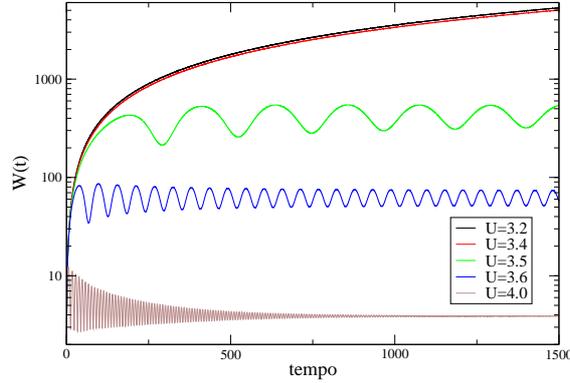
Analisemos agora o caso onde há correlação no sistema, ou seja, quando temos  $U \neq 0$  (mas mantendo  $\varepsilon = F = 0$ ). Trabalhos anteriores utilizaram a função de Anderson para mostrar que, considerando a distribuição inicial delta, o limiar de localização é  $U \approx 3.45$  [2], ou seja, para  $U < 3.45$  o pacote de ondas associado à partícula se estende na rede, já para  $U > 3.45$  o pacote localiza. Este resultado é confirmado através de nossa análise da função de Anderson, mostrada na figura 5.3, bem como pela análise da entropia de Shannon e da função de Wegner, mostradas nas figuras 5.4 e 5.5 respectivamente. A evolução temporal da função de onda na rede pode ser vista nas figuras A.1, A.2, A.3 e A.4.



**Fig. 5.3:** Evolução temporal da função de Anderson (5.18) para  $\varepsilon = F = 0$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Observe que há um limiar de localização entre  $U = 3.4$  e  $U = 3.5$ , onde a função de onda localiza.



**Fig. 5.4:** Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $\varepsilon = F = 0$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Observe que, para valores de  $U \leq 3.4$ , as curvas se superpõem.

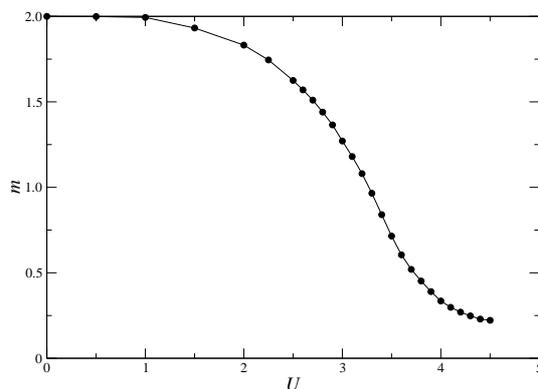


**Fig. 5.5:** Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $\varepsilon = F = 0$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial delta.

Analisando, neste ponto, o comportamento do  $msd$  (5.22) na presença de correlação no sistema, podemos perceber que, incrementando o valor de  $U$ , todas as curvas que ajustam a função  $msd$  da forma (5.30) possuem  $\alpha \approx 2$ , de forma que o limiar  $U \approx 3.45$  não fica evidenciado. Diante disso, resolvemos fazer uma análise um pouco diferente. Ao invés de ajustarmos o  $msd$  como apresentado em (5.30), onde o parâmetro que caracteriza o sistema é o expoente  $\alpha$ , consideramos agora o ajuste

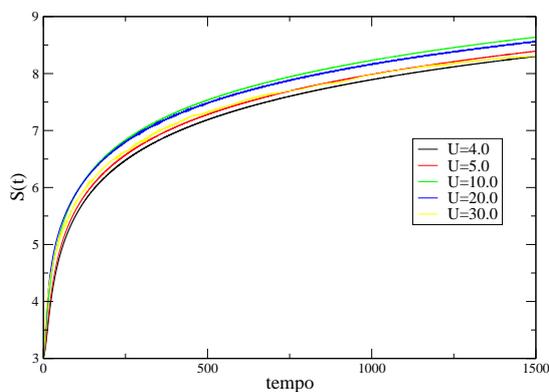
$$M(t) \approx m t^2 \quad (5.31)$$

sendo que aqui o parâmetro que nos fornece informação sobre o sistema é o prefator multiplicativo  $m$ . Fazendo a análise do valor deste parâmetro em função do termo de correlação  $U$ , mostrado no gráfico 5.6, podemos perceber uma mudança na curvatura no gráfico justamente em torno do ponto  $U \approx 3.45$ , evidenciando que o valor de  $m$  se reduz com maior intensidade em torno do ponto de transição entre estados estendidos e localizados. Desta forma, no que diz respeito a localização dinâmica em nosso sistema, está análise nos leva a concluir que o parâmetro que fornece mais informação sobre a localização do pacote de ondas não é o expoente  $\alpha$ , comumente utilizado, mas sim o fator multiplicativo  $m$ .

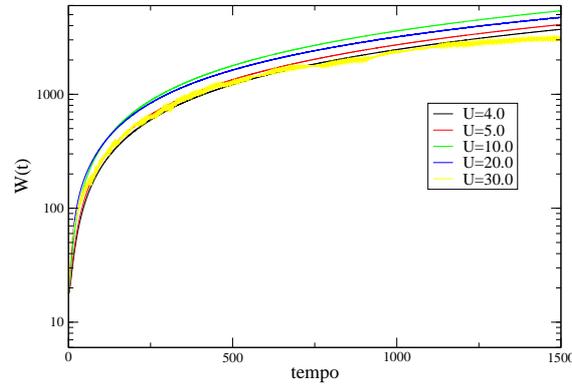


**Fig. 5.6:** Valor do prefator multiplicativo  $m$  (5.31) em função de  $U$ . Perceba que em torno do limiar  $U \approx 3.45$  a curva apresenta uma modificação na sua curvatura.

Para o caso em que temos a distribuição inicial em forma de uma gaussiana de  $\sigma = 5$ , este limiar de localização ( $U \approx 3.45$ ) não é mais observado, e podemos dizer que o sistema é estendido mesmo para grandes valores de  $U$ , como mostram os gráficos 5.7 e 5.8. A evolução do pacote neste caso pode ser vista nas figuras A.5, A.6 e A.7.



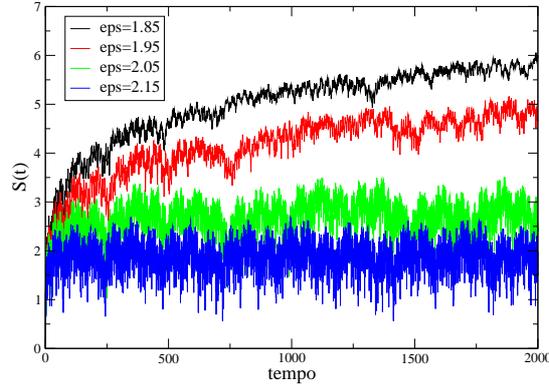
**Fig. 5.7:** Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $\varepsilon = F = 0$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .



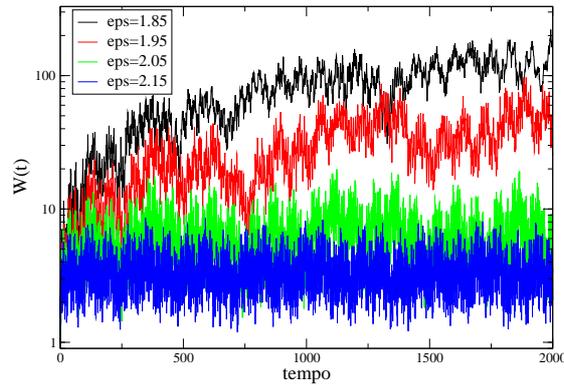
**Fig. 5.8:** *Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $\varepsilon = F = 0$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

### 5.3.2 Desordem

Consideramos agora apenas a introdução da desordem determinística em nosso sistema, ou seja, fazemos  $\varepsilon \neq 0$  ( $U = F = 0$ ). Sabe-se da literatura que um sistema com desordem aperiódica dada pelo modelo de Aubry-André tem como limiar de localização, para a distribuição inicial delta,  $\varepsilon \approx 2$  [10, 41]. Este limiar é verificado em nossa solução numérica, e pode ser constatado através da análise do comportamento da entropia de Shannon e da função de Wegner, dadas pelas figuras 5.9 e 5.10. Percebemos nestas figuras que ambas as funções oscilam em torno de um valor aproximadamente constante quando  $\varepsilon > 2$ , caracterizando a localização da partícula, já para  $\varepsilon < 2$  as funções tem comportamento crescente, indicando que a partícula se estende na rede. A evolução temporal do pacote de ondas pode ser visto nas figuras A.8, A.9, A.10 e A.11.



**Fig. 5.9:** *Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $U = F = 0$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (eps), considerando a distribuição inicial delta. Note que abre-se um gap em torno de  $\epsilon = 2$ .*

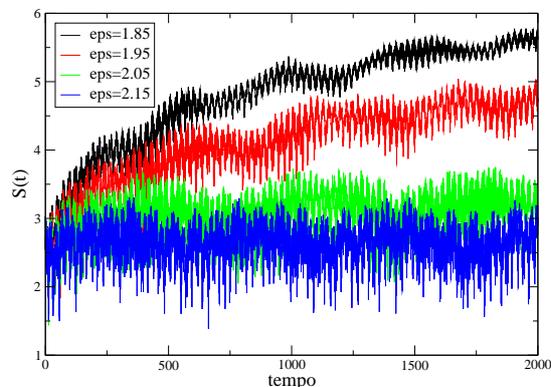


**Fig. 5.10:** *Evolução temporal da função e participação de Wegner (5.20) para  $U = F = 0$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (eps), considerando a distribuição inicial delta.*

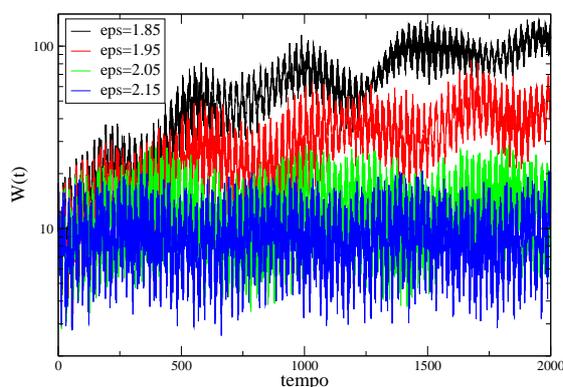
Para a distribuição inicial gaussiana, o mesmo limiar  $\epsilon \approx 2$  é observado, como mostram as figuras 5.11 e 5.12. A função de onda neste caso é mostrada nas figuras A.12, A.13, A.14 e A.15.

Neste ponto, é interessante frisar que a correlação e a desordem exibem comportamento bastante diferente frente às condições iniciais. O limiar de localização para a correlação,

observado na distribuição inicial tipo delta, desaparece para uma distribuição inicial gaussiana, enquanto no caso desordenado este limiar é invariante nas condições iniciais utilizadas.



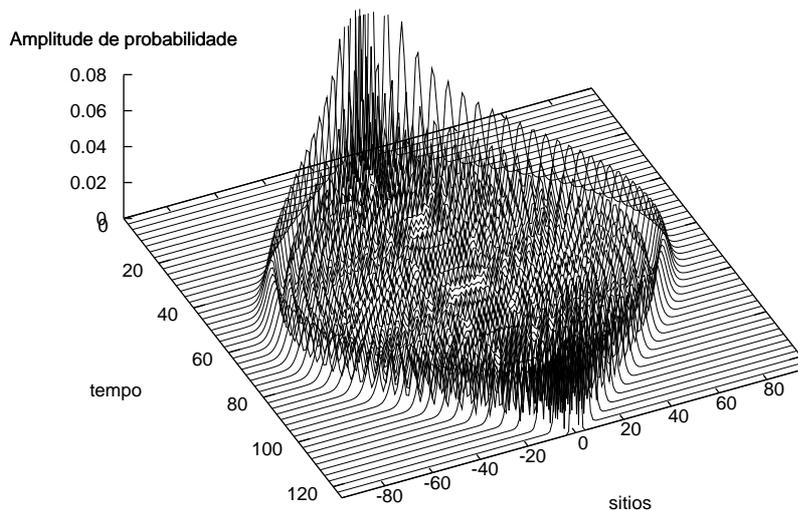
**Fig. 5.11:** Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $U = F = 0$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (*eps*), considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .



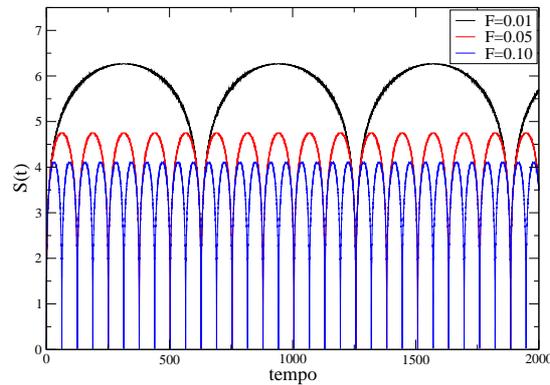
**Fig. 5.12:** Evolução temporal da função e participação de Wegner (5.20) para  $U = F = 0$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (*eps*), considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .

### 5.3.3 Campo elétrico

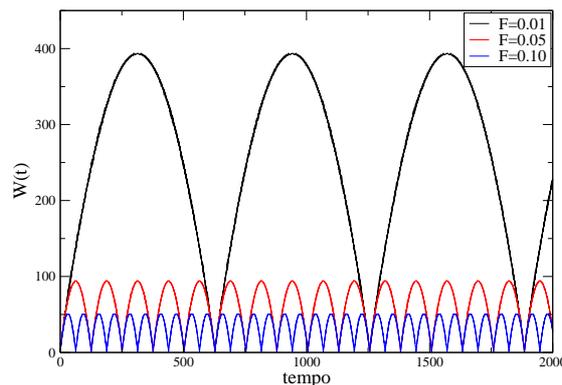
Agora, consideramos a inserção de um campo elétrico de externo ao sistema, ou seja, fazemos  $F \neq 0$  ( $U = \varepsilon = 0$ ). Como foi mostrado anteriormente, a introdução de um campo elétrico externo em nosso sistema tem como resultado o surgimento das chamadas oscilações de Bloch, que limitam a partícula a oscilar em uma determinada região da rede. Considerando a distribuição inicial delta, podemos verificar a precisão de nosso programa comparando a figura 5.13, obtida numericamente, com a figura 3.2, obtida analiticamente. Para esta distribuição inicial, o sistema permanece com seu ponto médio aproximadamente invariante no tempo, e apresenta uma respiração do pacote de ondas com período  $T_B$ , de forma que esta oscilação fica evidenciada nos gráficos da entropia de Shannon (figura 5.14) e da função de participação de Wegner (figura 5.15).



**Fig. 5.13:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial delta.*



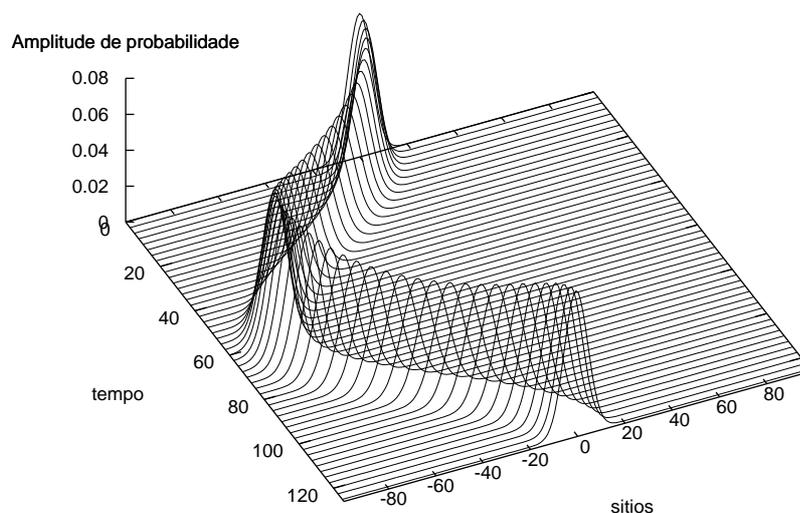
**Fig. 5.14:** *Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $U = \varepsilon = 0$  e diferentes valores de  $F$ , considerando a distribuição inicial delta.*



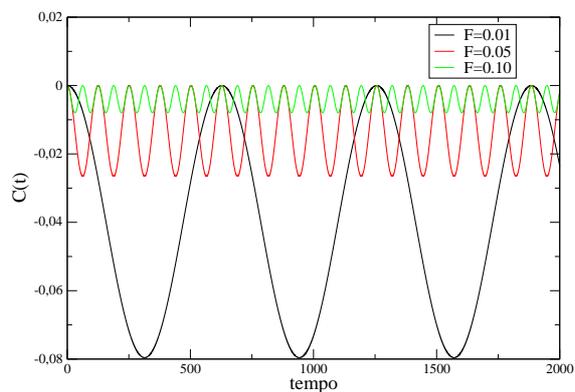
**Fig. 5.15:** *Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $U = \varepsilon = 0$  e diferentes valores de  $F$ , considerando a distribuição inicial delta.*

No caso da distribuição gaussiana, vemos que nosso resultado numérico, dado pela figura 5.16, se assemelha bastante com a solução analítica aproximada, apresentada na figura 3.3. Neste caso, vemos um comportamento oposto ao observado para a distribuição inicial delta, pois agora o ponto central da distribuição realiza uma oscilação de Bloch, como pode ser visto na figura 5.17, e o perfil da distribuição inicial permanece aproximadamente o mesmo na evolução temporal, o que pode ser visto na figura 5.16. Analisando nossos resultados com

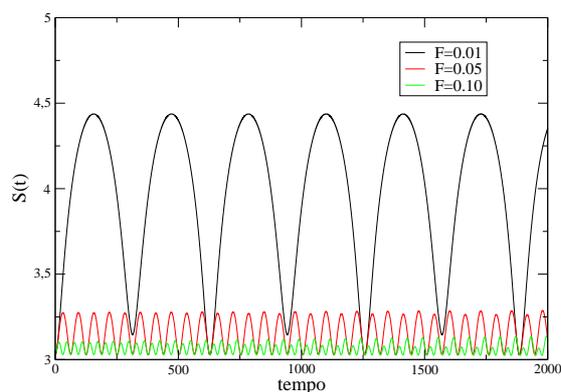
cuidado, percebemos que as aproximações analíticas para a distribuição inicial gaussiana, dadas por 3.27 e 3.59, apesar de descreverem razoavelmente bem a dinâmica do pacote de ondas, omitem uma pequena variação temporal na largura da gaussiana, que aumenta entre  $t = 0$  e  $t = T_B/4$ , e diminui entre  $t = T_B/4$  e  $t = T_B/2$ , voltando a sua forma original em  $t = T_B/2$ , ou seja, a largura da distribuição gaussiana realiza uma oscilação com período  $T_B/2$ , que pode ser observada nas figuras 5.18 e 5.19.



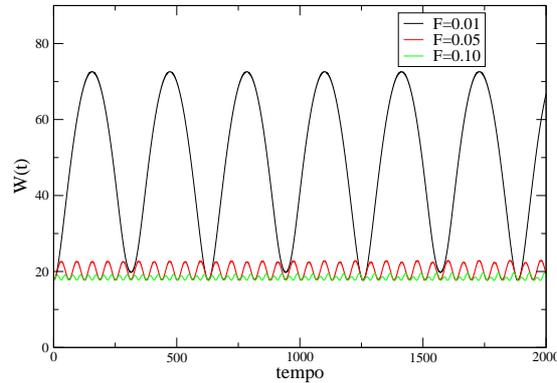
**Fig. 5.16:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



**Fig. 5.17:** *Evolução temporal da função centroide (5.21) para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e diferentes valores de  $F$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



**Fig. 5.18:** *Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $U = \varepsilon = 0$  e diferentes valores de  $F$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ . Perceba que a largura da distribuição gaussiana apresenta uma oscilação com período  $T_B/2$ , com os mínimos pares e ímpares levemente diferentes (observe o caso  $F = 0.01$ ).*



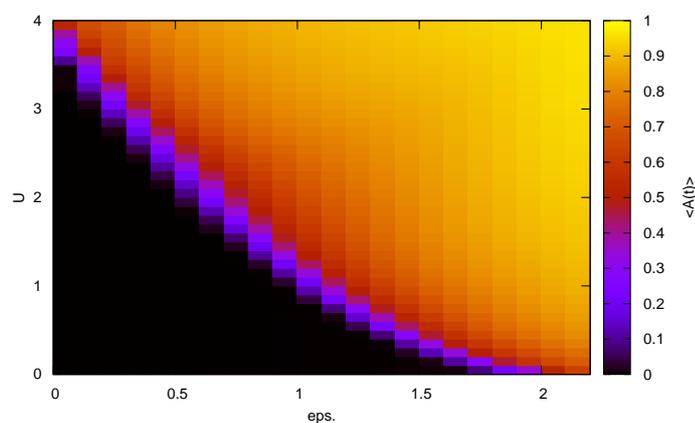
**Fig. 5.19:** *Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $U = \varepsilon = 0$  e diferentes valores de  $F$ , considerando a distribuição inicial gaussiana. Perceba que a largura da distribuição gaussiana apresenta uma oscilação com período  $T_B/2$ , com os mínimos pares e ímpares levemente diferentes (observe o caso  $F = 0.01$ ).*

### 5.3.4 Correlação e desordem

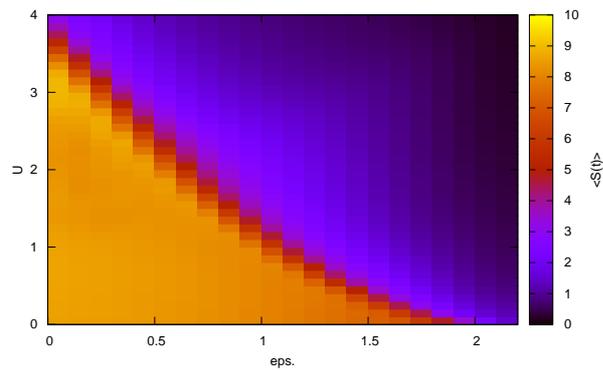
Para estudar os efeitos da ação conjunta da correlação e da desordem (mas sem campo) em nosso sistema, consideramos  $U \neq 0$  e  $\varepsilon \neq 0$  ( $F = 0$ ).

Atuando de forma isolada, mostramos anteriormente que a correlação e a desordem tendem a localizar a função de onda da partícula conforme a amplitude dos parâmetros que modelam cada um destes efeitos aumenta, de forma que existem regiões de transição razoavelmente claras entre estados estendidos e localizados ( $U \approx 3.45$  para correlação e  $\varepsilon \approx 2.0$  para desordem, no caso da distribuição inicial delta, e  $\varepsilon \approx 2.0$  para a distribuição inicial gaussiana). Para estudarmos a ação conjunta destes fenômenos, analisamos o comportamento das funções de Anderson e da entropia de Shannon em tempos grandes para diversas combinações de  $U$  e  $\varepsilon$ . As figuras 5.20 e 5.21 mostram diagramas  $U \times \varepsilon$  calculados considerando a condição inicial delta, onde as escalas de cores mostram o valor médio das respectivas funções entre os tempos  $t = 2180$  e  $t = 2200$  para  $\Delta t = 0.01$ , onde os valores médios foram calculados pois estas funções apresentam oscilações em torno de um valor assintótico, o qual desejamos considerar aqui (a função de participação de Wegner não foi

considerada pois esta apresenta grandes oscilações e demasiada demora na convergência para um valor assintótico). Nestes diagramas vemos claramente que existem duas regiões distintas: uma que possui valores pequenos da função de Anderson (e relativamente grandes da entropia de Shannon), sendo que nesta região de parâmetros o pacote de ondas se espalha na rede e o sistema é dito deslocalizado, já na outra região, separada da primeira por um limiar bastante claro, temos um grande valor para a função de Anderson (e uma diminuição da entropia de Shannon), evidenciando uma localização abrupta da função de onda para estes conjuntos de parâmetros. Podemos perceber também que esta curva que separa estados estendidos de estados localizados respeita os limiares  $U \approx 3.45$  (para  $\varepsilon = 0$ ) e  $\varepsilon = 2$  (para  $U = 0$ ) obtidos anteriormente.

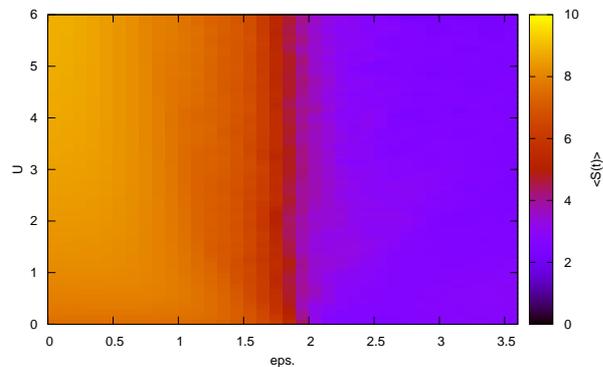


**Fig. 5.20:** Diagrama  $U \times \varepsilon(\text{eps.})$  para distribuição inicial delta, com o valor médio da função de Anderson entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



**Fig. 5.21:** Diagrama  $U \times \varepsilon(\text{eps.})$  para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .

Para o caso da distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ , a interação entre correlação e desordem apresentou limiares de localização equivalentes aos observados nos parâmetros considerados separadamente, ou seja, o sistema é estendido para  $\varepsilon < 2.0$  e localizado no caso contrário, independentemente da amplitude da correlação  $U$ . Este resultado pode ser visto na figura 5.22.

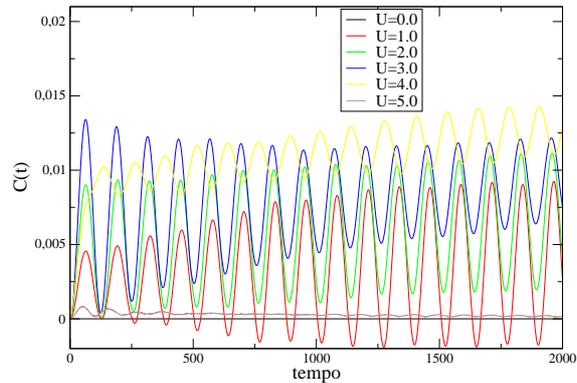


**Fig. 5.22:** Diagrama  $U \times \varepsilon(\text{eps.})$  para distribuição inicial gaussiana ( $\sigma = 5$ ), com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .

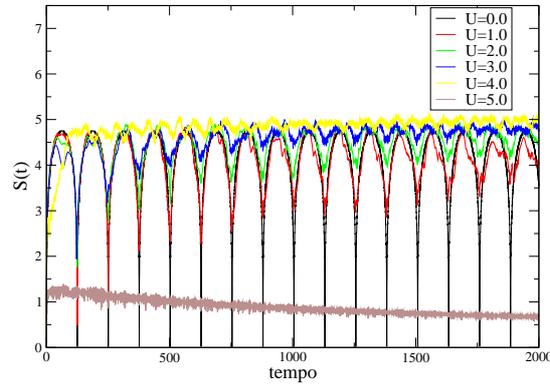
### 5.3.5 Correlação e campo elétrico

Vimos anteriormente que a aplicação de um campo elétrico de externo em nosso sistema leva a função de onda da partícula em questão a entrar em um regime oscilatório com um determinado período, proporcional ao inverso do módulo deste campo elétrico, chamado período de Bloch. Estas oscilações são conhecidas como oscilações de Bloch.

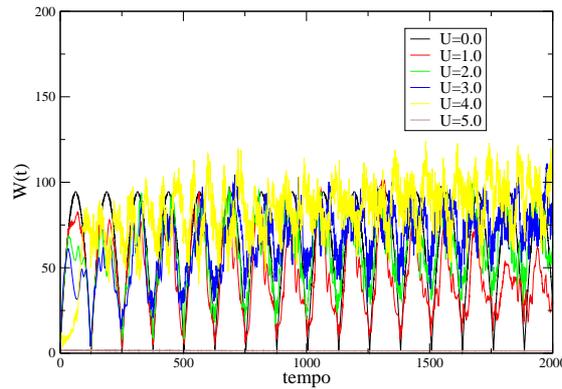
Ao introduzirmos o efeito da correlação concomitantemente ao efeito do campo elétrico externo, e considerando a distribuição inicial delta, observamos que conforme a intensidade da correlação aumenta, através do incremento do parâmetro  $U$ , a função de onda tende a se concentrar mais em um lado da oscilação até que, à partir de  $U \approx 4.0$ , a função de onda permanece quase que inteiramente localizada no sítio de origem. Este efeito é claramente observado nas figuras 5.23, 5.24 e 5.25 (ver figuras A.17, A.22, A.23 e A.24).



**Fig. 5.23:** *Evolução temporal da função centróide (5.21) para  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Note que o pacote localiza para  $U = 5$ .*



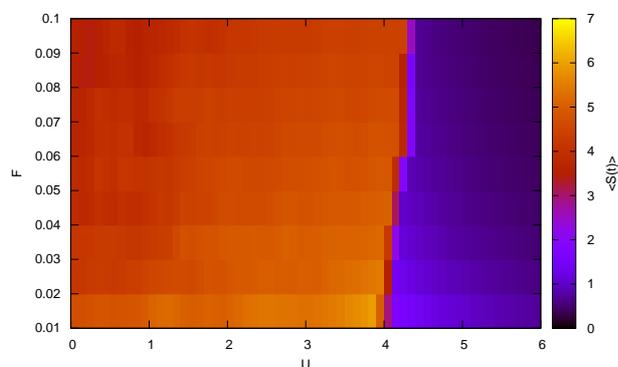
**Fig. 5.24:** *Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Note que o pacote localiza para  $U = 5$ .*



**Fig. 5.25:** *Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial delta. Note que o pacote localiza para  $U = 5$  ( $W(t) \approx 0$  neste caso).*

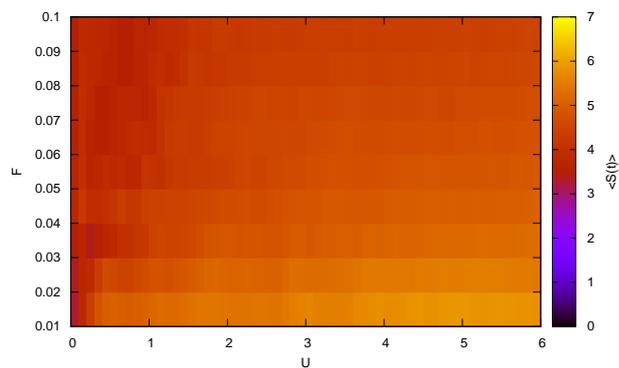
O limiar  $U \approx 4.0$  pode ser visto com mais clareza no diagrama mostrado na figura 5.26 que fornece o valor médio da função entropia de Shannon próximo de  $t = 2200$ , para diferentes valores do campo elétrico ( $F$ ) e da correlação ( $U$ ). Vemos neste diagrama que, ao incrementarmos o valor de  $U$  em um sistema com campo elétrico, a entropia de Shannon

cai bruscamente quando atingimos valores de correlação em torno do limiar referido, isso caracteriza uma localização abrupta da função de onda na rede.

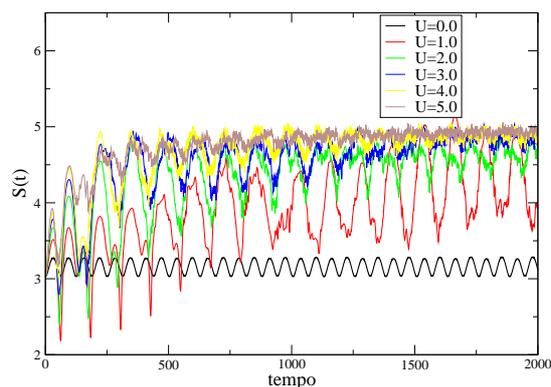


**Fig. 5.26:** Diagrama  $F \times U$  para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .

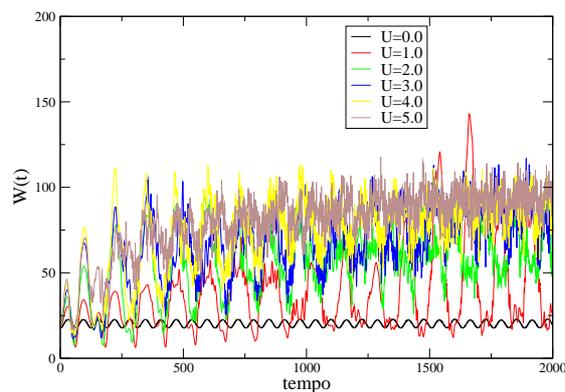
Analisando o efeito concomitante do campo e da correlação utilizando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ , percebemos que o limiar  $U \approx 4.0$ , presente para a distribuição inicial delta, não é mais observado, como pode ser visto no diagrama da figura 5.27. Vimos anteriormente que para a distribuição inicial gaussiana, o campo elétrico faz o ponto médio do pacote de ondas oscilar, mantendo o perfil inicial da distribuição aproximadamente invariante. Ao inserirmos o efeito da correlação neste sistema, o perfil da distribuição do pacote de ondas perde sua (aproximada) invariância temporal, como pode ser visto nas figuras 5.28 e 5.29 (ver figuras A.20, A.25, A.26 e A.27). O ponto médio da distribuição permanece oscilando com o mesmo período, porém com amplitude diferente, como fica evidenciado pela figura 5.30.



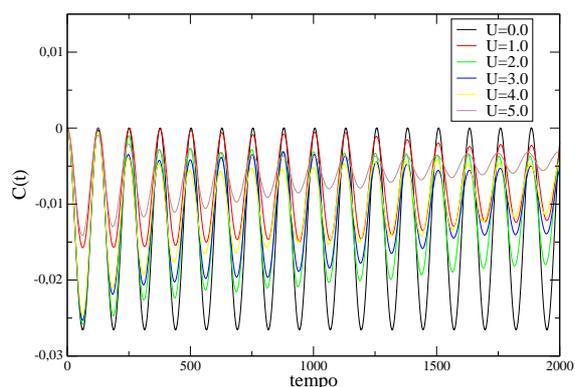
**Fig. 5.27:** Diagrama  $F \times U$  para distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



**Fig. 5.28:** Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .



**Fig. 5.29:** *Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

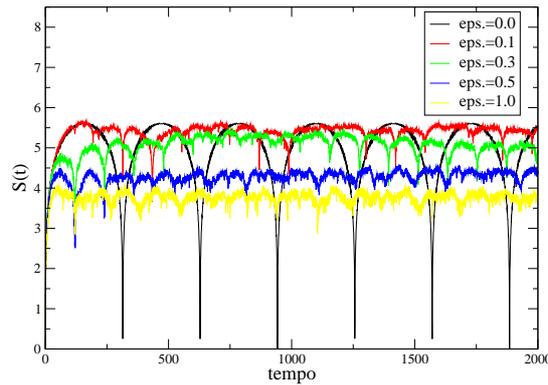


**Fig. 5.30:** *Evolução temporal da função centróide (5.21) para  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e diferentes valores de  $U$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

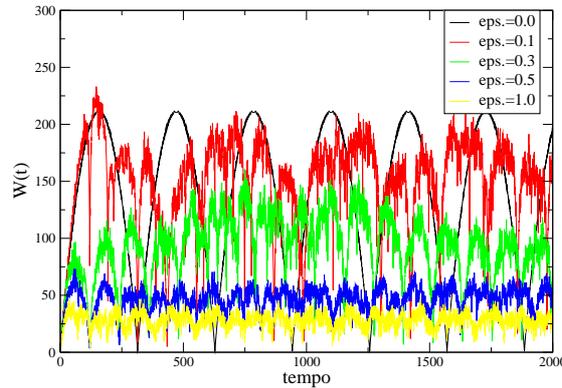
### 5.3.6 Desordem e campo elétrico

Consideremos agora o efeito da desordem determinística em conjunto com um campo elétrico dc externo aplicado, para isso, mantemos  $U = 0$  e variamos os valores de  $\varepsilon$  e  $F$ .

Dada a distribuição inicial delta, vimos anteriormente que para  $\varepsilon = 0$  o pacote de ondas oscila simetricamente em torno do sítio de origem, caracterizando uma oscilação de Bloch. Ao inserir a desordem determinística em nosso sistema, percebemos que o pacote de ondas que, no caso ordenado, oscilava como um todo, agora apresenta uma aparente fragmentação, como pode ser visto na figura A.28. Observando esta figura com cuidado, podemos ver que algumas partes da amplitude de probabilidade retornam ao sítio de origem em tempos anteriores ao período de Bloch para o campo correspondente ( $T_B = 100\pi$ ), tornando à partir deste momento a fazer uma nova oscilação, enquanto que a parte restante permanece oscilando com período  $T_B$ . Uma tendência a localização também é observada, pois parte da amplitude de probabilidade permanece concentrada em torno do sítio de origem. Essa tendência a localização aumenta com o incremento do módulo da desordem  $\varepsilon$ , como pode ser observado nos gráficos apresentados pelas figuras 5.31 e 5.32 (ver figuras A.16, A.28, A.29 e A.30).



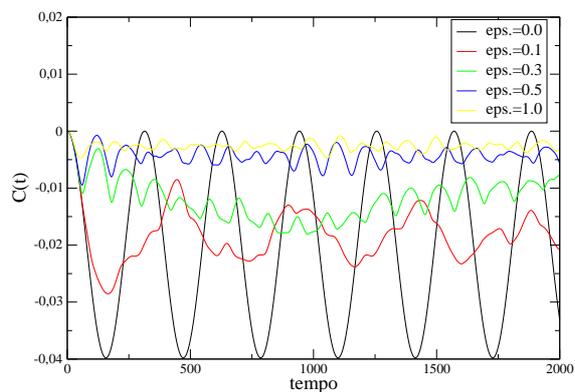
**Fig. 5.31:** *Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e diferentes valores de  $\varepsilon$  (eps.), considerando a distribuição inicial delta.*



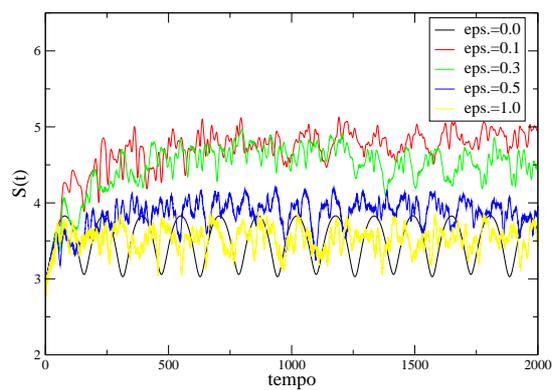
**Fig. 5.32:** *Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e diferentes valores de  $\varepsilon$  (eps.), considerando a distribuição inicial delta.*

Analisemos agora o efeito da desordem aperiódica no sistema com campo elétrico, quando o pacote de ondas está inicialmente distribuído como uma gaussiana de  $\sigma = 5$ . Para o caso ordenado, a dinâmica do pacote já foi descrita anteriormente e pode ser vista no gráfico A.19. Ao inserirmos desordem no sistema, percebemos um efeito semelhante ao observado para a distribuição inicial delta, onde o pacote de ondas se divide e cada parte oscila de forma diferente. Para a distribuição inicial gaussiana, percebemos que no início da dinâmica o pacote tende a realizar uma oscilação de Bloch como a do caso ordenado, porém gradativamente partes da amplitude de probabilidade se desprendem durante esta oscilação em direção à região onde o pacote foi originalmente lançado e começam a oscilar com o mesmo período de Bloch  $T_B$ . Esse efeito pode ser visto na figura A.31.

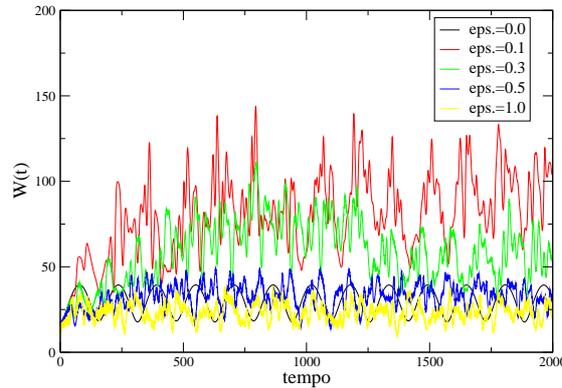
Conforme incrementamos o valor do parâmetro  $\varepsilon$ , podemos observar que a parte que se desprende do pacote é cada vez mais significativa e existe uma forte tendência do pacote em permanecer próximo a região onde foi lançado originalmente. Este efeito pode ser visto no gráfico da função centróide, apresentado na figura 5.33 (ver figuras A.19, A.31, A.32 e A.33). As funções de Shannon e Wegner (figuras 5.34 e 5.35) inicialmente crescem com o aumento de  $\varepsilon$  devido a fragmentação do pacote, mas retornam aos valores originais quando o pacote tende a oscilar em torno dos sítios onde fora lançado.



**Fig. 5.33:** *Evolução temporal da função centróide (5.21) para  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (eps.), considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



**Fig. 5.34:** *Evolução temporal da entropia de Shannon (5.19) para  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (eps.), considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



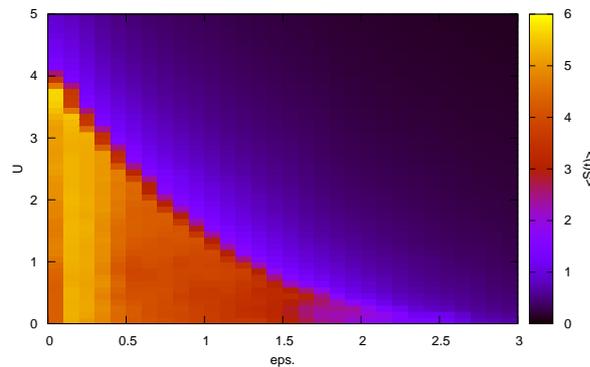
**Fig. 5.35:** Evolução temporal da função de participação de Wegner (5.20) para  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e diferentes valores de  $\epsilon$  (eps.), considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .

### 5.3.7 Correlação, desordem e campo elétrico

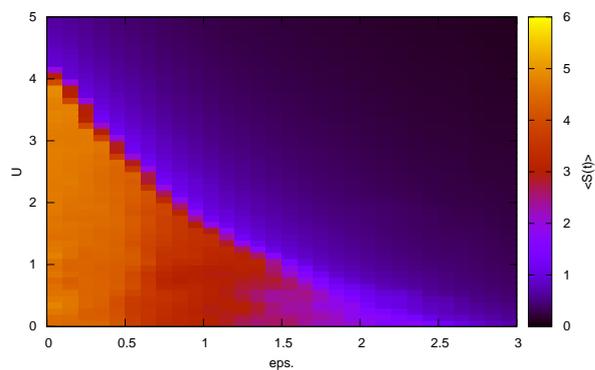
Analisados os efeitos da correlação, da desordem e do campo elétrico atuando de forma isolada em nosso sistema, bem como das combinações correlação-desordem, correlação-campo elétrico e desordem-campo elétrico, partimos agora para o estudo dos efeitos da inserção das três características de forma conjunta.

Primeiramente, analisamos o efeito da atuação conjunta da correlação, da desordem e do campo elétrico no caso onde a partícula está inicialmente distribuída como uma delta. Para esta configuração, analisamos os diagramas  $U \times \epsilon$  considerando diferentes valores para o módulo do campo. Estes diagramas são apresentados nas figuras 5.36, 5.37, 5.38 e 5.39, e apresentam um limiar entre estados localizados e deslocalizados bastante parecido com o observado na figura 5.21 (sem campo), porém, é preciso estar atento para a diferença entre os diagramas  $U \times \epsilon$  com campo elétrico apresentados aqui, e o diagrama sem campo. No diagrama que tem  $F = 0$  (figura 5.21), o limiar observado separa estados estendidos de estados bastante localizados no sítio onde a partícula foi inicialmente lançada. Aqui, consideramos sendo estados estendidos aqueles onde a amplitude da função de onda tende a zero em todos os sítios da rede. Por outro lado, na presença de campo elétrico (figuras 5.36, 5.37, 5.38 e 5.39), o limiar observado separa estados ditos deslocalizados, de estados

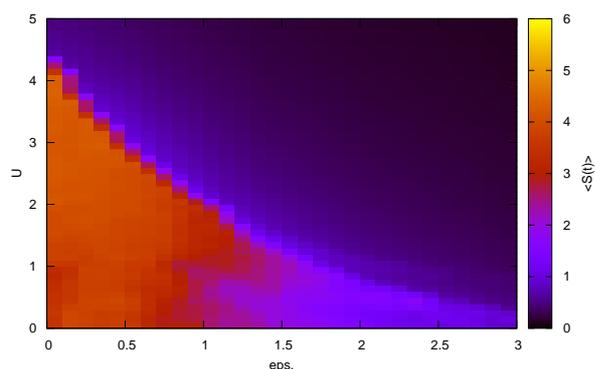
localizados, porém aqui, consideramos deslocalizados os estados que não tem sua dinâmica significativamente alterada e permanecem aproximadamente oscilando com período relativo ao campo elétrico aplicado. Neste caso, analisando os diagramas citados, podemos observar que a inserção da correlação e da desordem no sistema com campo tende a localizar o pacote de ondas em torno do sítio onde a partícula fora inicialmente lançada, de forma que um limiar de transição entre estados estendidos e localizados pode ser observado (ver figura 5.36). Ao aumentar a intensidade do campo elétrico, pode-se observar que a curva que descreve o limiar referido se desloca levemente para valores maiores de  $U$ . Percebe-se também que, na região do limiar próximo a  $\varepsilon \approx 2$ , existe um aparente avanço da região de estados localizados sobre a região de estados deslocalizados, mostrando uma gradual tendência à localização da partícula nesta região (ver figuras 5.37, 5.38 e 5.39). Estes resultados evidenciam um comportamento bastante diferente dos limiares de localização relacionados com a correlação e com a desordem, frente à mudança do campo elétrico. O incremento da intensidade do campo leva o limiar de localização para valores maiores de  $U$ , por outro lado, leva para valores menores de  $\varepsilon$ , na região em que  $U \approx 0$ .



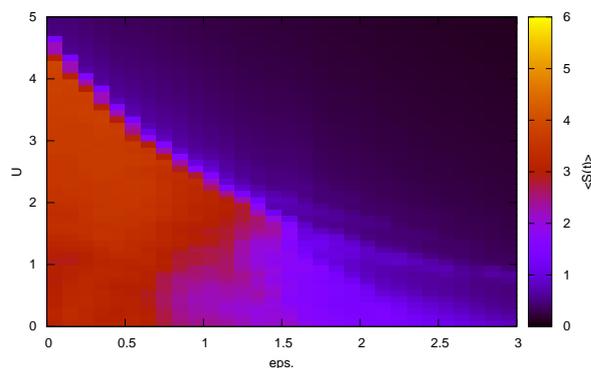
**Fig. 5.36:** Diagrama  $U \times \varepsilon(\text{eps.})$  considerando  $F = 0.02$ , para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



**Fig. 5.37:** Diagrama  $U \times \varepsilon(\text{eps.})$  considerando  $F = 0.05$ , para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .

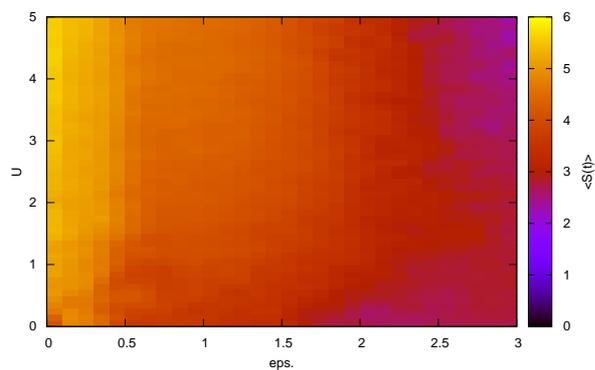


**Fig. 5.38:** Diagrama  $U \times \varepsilon(\text{eps.})$  considerando  $F = 0.1$  para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .

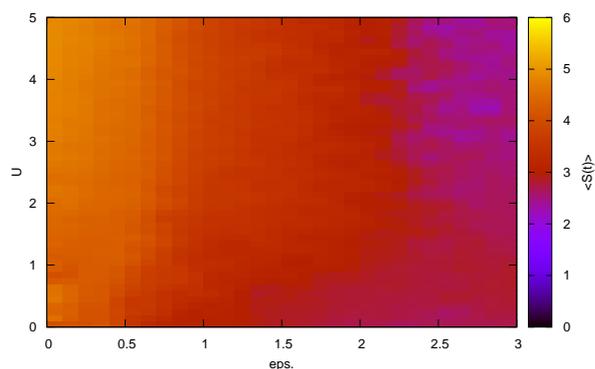


**Fig. 5.39:** Diagrama  $U \times \epsilon(\text{eps.})$  considerando  $F = 0.2$  para distribuição inicial delta, com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .

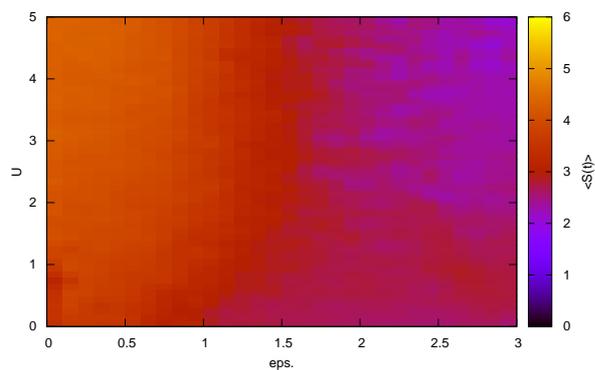
Para a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ , vimos anteriormente que na ausência de campo elétrico, a interação entre correlação e desordem apresenta um limiar de localização razoavelmente claro, localizado em  $\epsilon \approx 2.0$  e independente da intensidade da correlação (ver figura 5.22). Diferentemente dos resultados obtidos para a distribuição inicial delta, onde a inserção do campo em um sistema com desordem e correlação apresenta um limiar de localização razoavelmente semelhante com o observado no sistema sem campo, neste caso o efeito da inserção do campo elétrico não apresenta um limiar de localização bem definido, como pode ser visto nas figuras 5.40, 5.41, 5.42 e 5.43. Neste caso, o limiar abrupto em  $\epsilon = 2$  desaparece e o aumento da localização, tanto com a desordem como com a correlação, passa a ser gradual.



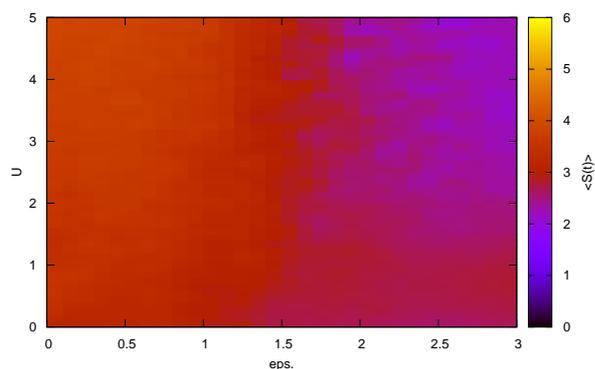
**Fig. 5.40:** Diagrama  $U \times \epsilon(\text{eps.})$  considerando  $F = 0.02$ , para distribuição inicial gaussiana de  $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



**Fig. 5.41:** Diagrama  $U \times \epsilon(\text{eps.})$  considerando  $F = 0.05$ , para distribuição inicial gaussiana de  $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



**Fig. 5.42:** Diagrama  $U \times \epsilon$  (eps.) considerando  $F = 0.1$  para distribuição inicial gaussiana de  $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



**Fig. 5.43:** Diagrama  $U \times \epsilon$  (eps.) considerando  $F = 0.2$  para distribuição inicial gaussiana de  $\sigma = 5$ , com o valor médio da função entropia de Shannon entre  $t = 2180$  e  $t = 2200$ .



## Capítulo 6

# Análise geral e conclusões

O escopo central do estudo apresentado nesta dissertação consistiu na classificação das soluções da equação de Schrödinger não linear unidimensional proposta (5.1), no que diz respeito aos fenômenos de localização dinâmica, caracterizando estes efeitos em função dos parâmetros que regulam a intensidade da correlação ( $U$ ), da desordem ( $\varepsilon$ ) e do campo elétrico ( $F$ ).

Primeiramente, fizemos uma introdução da equação de Schrödinger não linear (NLSE), enfatizando sua aplicabilidade em diversos ramos da física, tomando como exemplos a descrição de pólarons em uma rede unidimensional, a modelagem de guias de onda no contexto da óptica não linear, e a abordagem da teoria de campo médio nos condensados de Bose-Einstein. Introduzimos também a desordem aperiódica, apresentando o modelo de Anderson e, principalmente, o modelo de Aubry-André. Por fim, introduzimos o efeito da aplicação de um campo elétrico, enunciando o surgimento das oscilações de Bloch, sendo este fenômeno crucial na descrição e estudo do nosso sistema.

Após, realizamos um desenvolvimento analítico da NLSE no limite tight-binding unidimensional. Analisamos detalhadamente o caso da partícula livre considerando duas condições iniciais específicas: a distribuição delta, com apenas um sítio populado, e a condição gaussiana, com vários sítios populados em uma distribuição gaussiana de desvio padrão  $\sigma = 5$ .

Fizemos também um estudo teórico da influência do campo elétrico, onde obtivemos expressões analíticas que evidenciaram o aparecimento das oscilações de Bloch para os dois tipos de condições iniciais acima citados. Estes resultados foram calculados no intuito de realizarmos uma comparação com os resultados numéricos posteriormente obtidos.

A influência da desordem na localização dinâmica de estados eletrônicos foi discutida, e o caso de uma molécula de dois sítios foi tomado como exemplo. Enunciamos ainda os modelos de Anderson e de Aubry-André, sendo este último o modelo estudado numericamente

nesta dissertação. A escolha do modelo de Aubry-André foi motivada pela existência de um limiar de localização bem definido  $\varepsilon = 2$ , que separa estados localizados de estados estendidos, como foi discutido no capítulo 4.

Os resultados obtidos em nosso estudo numérico permitiram-nos encontrar e classificar consideravelmente bem as regiões de parâmetros  $(U, \varepsilon, F)$  em que o sistema apresenta soluções localizadas ou estendidas em função do tempo. Para que esta classificação fosse feita, propusemos a análise de funções que representam o comportamento do pacote como um todo na rede, como por exemplo as funções de Shannon e Wegner, e também utilizamos critérios tradicionais de análise de localização, como a função de Anderson. Os resultados obtidos estão sumarizados a seguir.

Inicialmente, resolvemos numericamente o caso da partícula livre ( $U = \varepsilon = F = 0$ ), com a finalidade de averiguar a eficácia de nosso programa. O teste obteve magnífico êxito, já que os resultados numéricos mostraram-se em pleno acordo com os resultados analíticos obtidos anteriormente.

Na sequência, consideramos os efeitos da correlação ( $U$ ) e da desordem ( $\varepsilon$ ) separadamente. Para uma distribuição inicial em forma de uma delta centrada no sítio central da rede, vimos que a correlação atuando isoladamente apresenta um limiar de localização em  $U \approx 3.45$ , resultado este que está de acordo com o limiar obtido na literatura [2]. Para a atuação isolada da desordem, constatamos que a partícula localiza para valores maiores do que  $\varepsilon = 2$ , sendo este o limiar de localização demonstrado analiticamente para este modelo na referência [10]. Por outro lado, considerando o pacote inicialmente distribuído como uma gaussiana de largura  $\sigma = 5$  e centrada no centro da rede, o pacote não apresentou localização dinâmica para nenhum valor de  $U$  até  $U = 20$ , já o limiar para a desordem permaneceu sendo  $\varepsilon = 2$ .

Ao considerarmos a interação entre correlação ( $U$ ) e desordem ( $\varepsilon$ ) conjuntamente, para uma distribuição inicial em forma de uma delta, percebemos uma curva de transição bem clara entre parâmetros que geram estados estendidos e localizados, iniciando em  $(U \approx 3.45, \varepsilon = 0)$  e indo até  $(U = 0, \varepsilon = 2)$  como pode ser observado nas figuras 5.20 e 5.21. Para a distribuição inicial na forma gaussiana, por outro lado, o limiar de localização não apresentou dependência na correlação  $U$ , apenas na desordem, tendo o ponto  $\varepsilon = 2$  como fronteira entre estados localizados e estendidos, como mostra a figura 5.22.

Ao analisarmos a influência exclusiva do campo elétrico de externo ( $F$ ), observamos que o sistema apresentou oscilações com período de Bloch  $T_B$ , sendo que, para a distribuição inicial delta, o pacote "respira" mantendo o ponto médio da distribuição invariante, já para

a distribuição gaussiana com  $\sigma = 5$ , é o ponto médio que oscila com o período de Bloch, e a largura do pacote permanece praticamente inalterada. Os resultados numéricos obtidos para a distribuição inicial delta se mostraram em pleno acordo com a solução analítica correspondente. Para o caso da distribuição inicial gaussiana, porém, os resultados numéricos se mostraram aproximadamente igual a sua descrição analítica, tendo como diferença o aparecimento de uma pequena oscilação da largura do pacote, com período  $T_B/2$ . Porém, como a descrição analítica deste caso é apenas uma aproximação, podemos dizer que o resultado numérico é bastante satisfatório, afinal, apresenta grande semelhança com sua aproximação analítica.

Considerando concomitantemente os efeitos do campo elétrico ( $F$ ) e da correlação ( $U$ ), percebemos que o incremento de  $U$  em um sistema com campo tende a localizar o pacote. Para a distribuição inicial delta, o aumento da correlação faz com que o pacote se concentre mais em um lado da oscilação de Bloch, até que para valores a partir de  $U \approx 4$ , o pacote permanece quase completamente localizado no sítio central, descaracterizando quase completamente as oscilações de Bloch, como indicam as figuras A.22, A.23 e A.24. Já para a distribuição inicial gaussiana, observa-se que o incremento em  $U$  faz com que o pacote perca sua forma original, e o seu ponto médio oscile com amplitude cada vez menor, porém, não se observa um limiar de transição claro, como no caso da distribuição delta. Este efeito é observado nas figuras A.25, A.26 e A.27.

Na interação entre os efeitos do campo elétrico ( $F$ ) e da desordem ( $\varepsilon$ ), considerando a distribuição inicial delta, observamos que conforme aumentamos a intensidade da desordem no sistema com campo o pacote de ondas apresenta uma aparente perda de coerência e tendência à localização, mantendo o ponto médio da distribuição aproximadamente invariante. Com a distribuição inicial gaussiana, uma tendência à localização é igualmente observada. As oscilações com período de Bloch apresentadas pelo ponto médio do pacote passam a ser erráticas e com uma amplitude cada vez menor, e as pequenas oscilações observadas na largura do pacote, de período  $T_B/2$ , também apresentam comportamento errático e sua amplitude é reduzida.

Finalmente, consideramos o efeito dos três parâmetros concomitantemente. Os resultados apresentados nesta seção foram obtidos através da análise gráfica do comportamento médio em tempos grandes das funções de Anderson e Shannon. Desta forma, diagramas  $U \times \varepsilon$  foram feitos considerando diferentes valores de campo elétrico. Para a distribuição delta inicial sem campo, a interação desordem-correlação apresentou um limiar bastante claro entre estados estendidos e localizados, observados nos diagramas  $U \times \varepsilon$  (5.20 e 5.21).

Ao incluir o campo elétrico, incrementando gradualmente os valores de  $U$  e  $\varepsilon$ , observamos que as oscilações de Bloch sofrem uma localização consideravelmente brusca em um limiar aproximadamente igual ao apresentado no caso sem campo (figuras 5.20 e 5.21). Conforme aumentamos o módulo do campo elétrico, a curva que determina este limiar apresenta uma translação para valores mais elevados de  $U$ , e uma maior localização no aumento de  $\varepsilon$  é observada, como pode ser observado nas figuras 5.36, 5.37, 5.38 e 5.39. Para a distribuição inicial gaussiana, o sistema apresenta um aumento gradual na localização, tanto para  $U$  quanto para  $\varepsilon$ , com maior intensidade neste último, porém, nenhum limiar de localização é observado neste caso, como mostram as figuras 5.40, 5.41, 5.42 e 5.43.

O estudo realizado nesta dissertação nos permitiu confirmar a eficácia do método de Crank-Nicholson na resolução de nossa equação de Schrödinger não linear, tendo em vista o fato de que todos os resultados obtidos através do uso deste método apresentaram boa concordância com resultados analíticos e com alguns resultados retirados da literatura, obtidos com outros métodos.

Com relação às soluções obtidas em nosso estudo numérico, percebemos que tanto a correlação quanto a desordem tendem a localizar o pacote de ondas na rede, porém cada uma o faz de maneira diferente. Além da evolução temporal da função de onda apresentar bastante diferença frente o incremento de  $U$  e de  $\varepsilon$ , constatamos que o limiar de localização, para a distribuição inicial delta, da desordem é menor do que o da correlação ( $\varepsilon \approx 2$  enquanto  $U \approx 3.45$ ). Outra diferença observada entre a desordem e a correlação foi no comportamento dos respectivos limiares de localização frente a aplicação do campo elétrico. Para a distribuição delta, no sistema com correlação, o campo levou o limiar para valores levemente maiores de  $U$ , por outro lado, a inserção do campo no sistema desordenado, além de fazer com que este limiar fosse menos abrupto, trouxe-o para valores um pouco menores de  $\varepsilon$ . Estes resultados podem ser verificados nas figuras 5.36, 5.37, 5.38 e 5.39.

Outra conclusão importante que pudemos chegar nesta dissertação foi a importância central das condições iniciais na solução do problema. As duas condições iniciais utilizadas, distribuição tipo delta e tipo gaussiana, mostraram enorme influência, não só na evolução temporal do pacote, mas também nas regiões de parâmetros onde o pacote é localizado ou estendido. Observamos também que a distribuição inicial delta tende a apresentar limiares de localização mais claros e abruptos, enquanto a distribuição inicial gaussiana tende a apresentar transições mais suaves. Neste estudo, utilizamos a distribuição inicial gaussiana com desvio padrão  $\sigma = 5$ , porém, baseado no argumento da referência [45], podemos

considerar que o comportamento qualitativo do sistema, para distribuições gaussianas com qualquer desvio padrão, é aproximadamente igual, o que torna nossos resultados bastante genéricos.

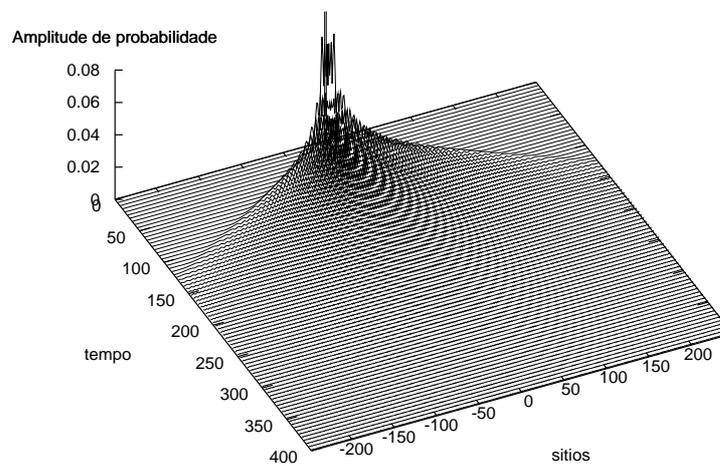


## Apêndice A

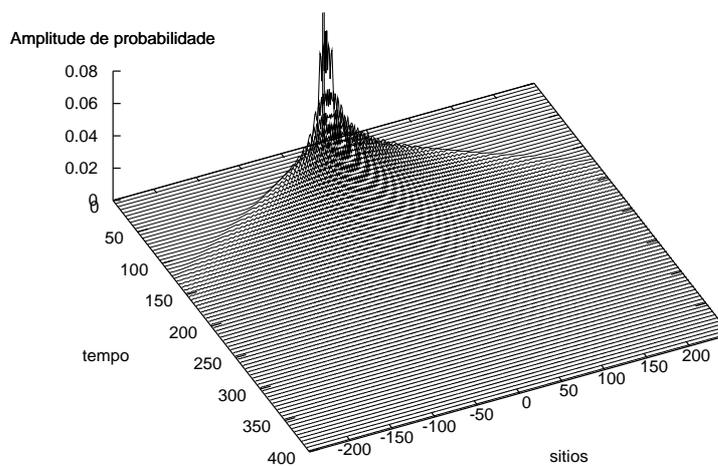
# Figuras da evolução temporal da densidade de probabilidade

Neste apêndice apresentamos as figuras tridimensionais da evolução temporal de  $|\psi_n(t)|^2$  para diferentes conjuntos de parâmetros.

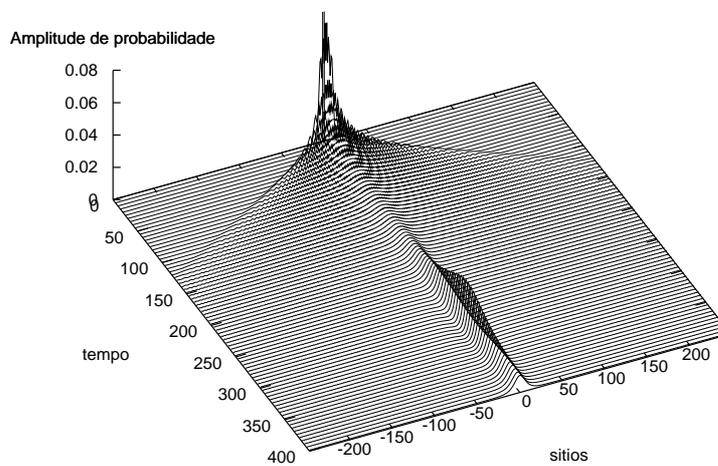
### A.1 Correlação



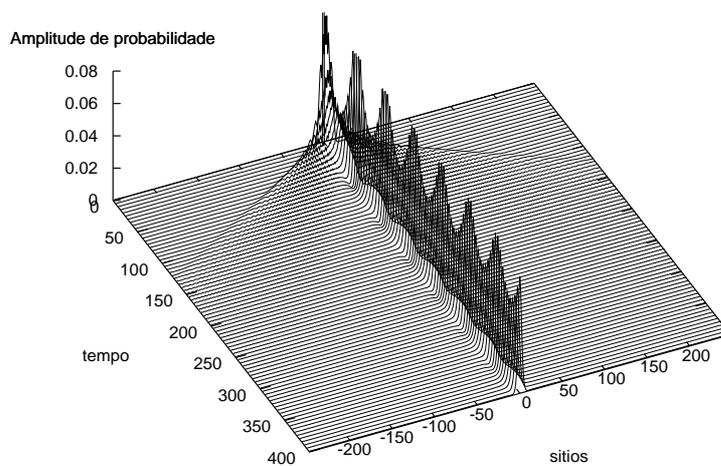
**Fig. A.1:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 3.2$ , considerando a distribuição inicial delta.*



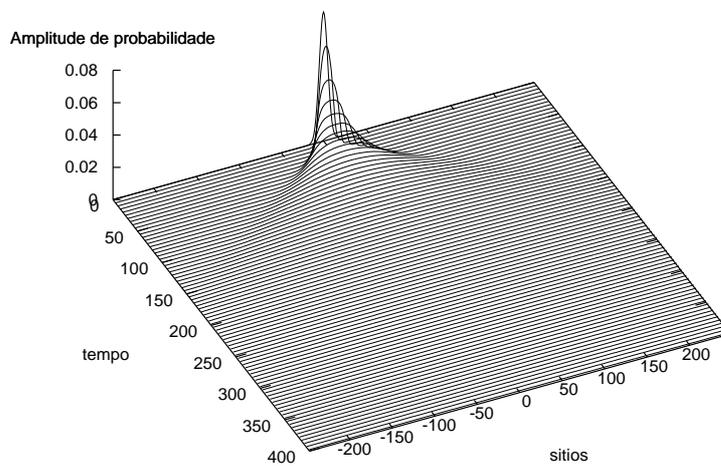
**Fig. A.2:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 3.4$ , considerando a distribuição inicial delta.*



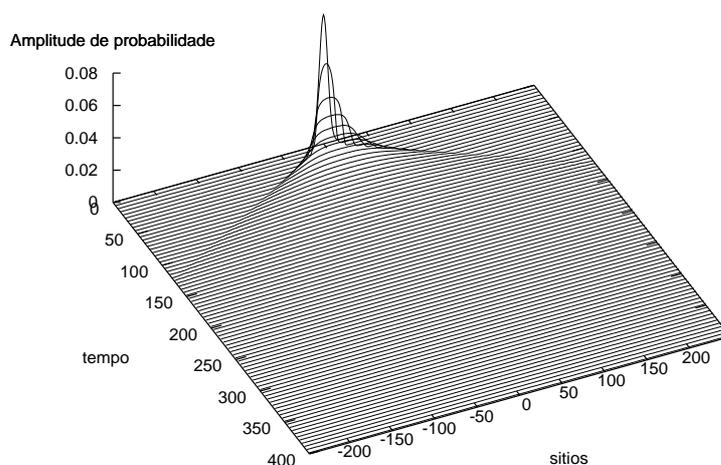
**Fig. A.3:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 3.5$ , considerando a distribuição inicial delta.*



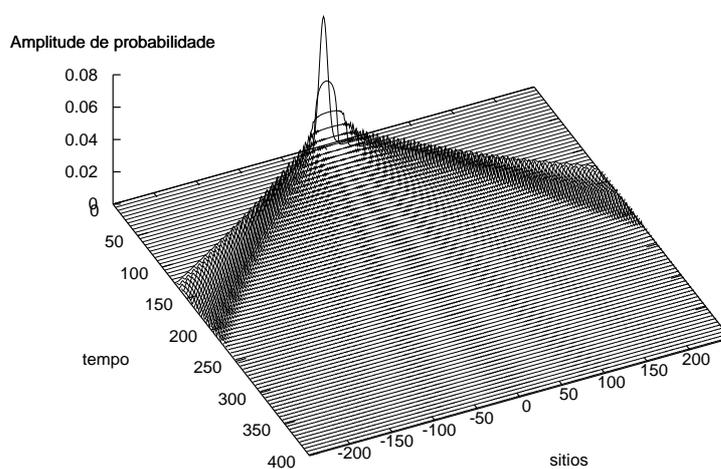
**Fig. A.4:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 3.6$ , considerando a distribuição inicial delta.*



**Fig. A.5:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 5.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

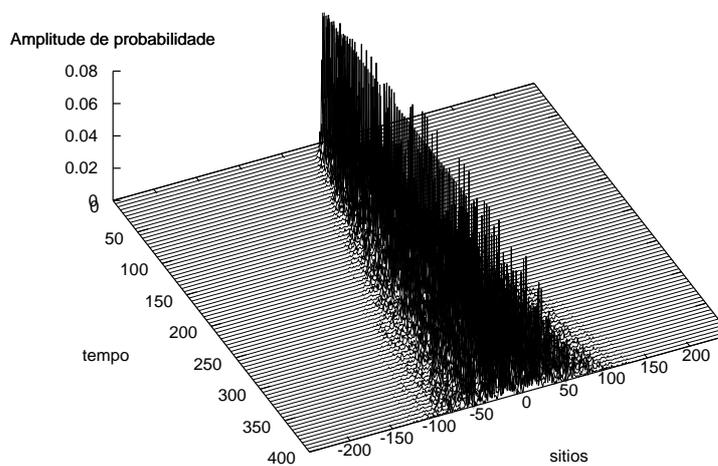


**Fig. A.6:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 10.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

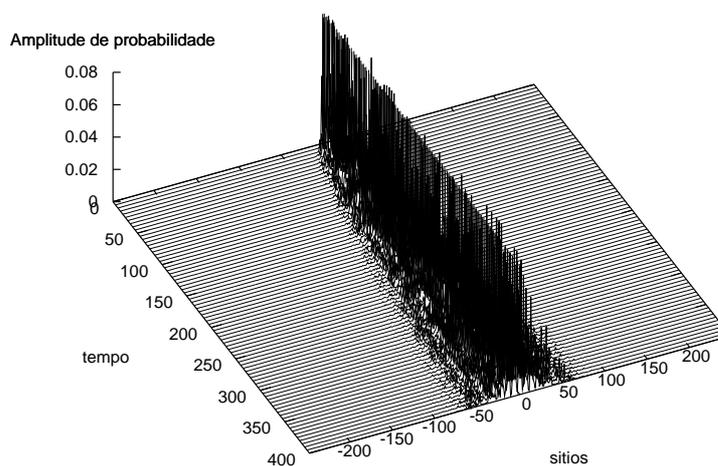


**Fig. A.7:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = F = 0$  e  $U = 20.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

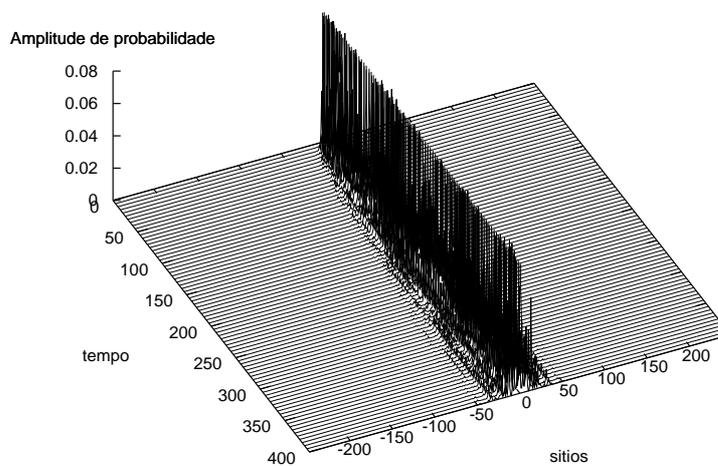
## A.2 Desordem



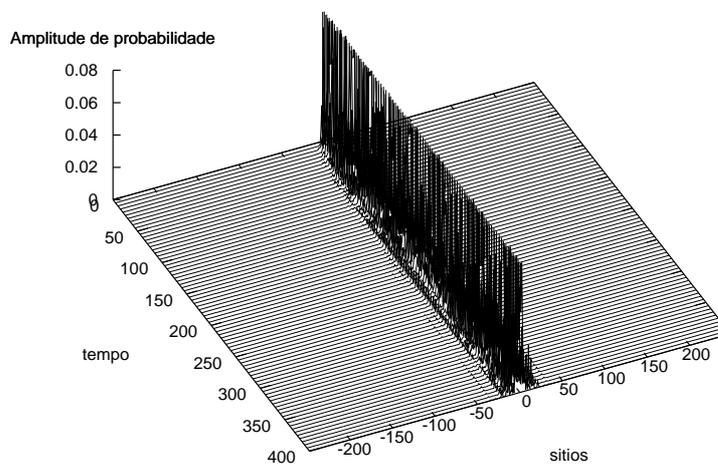
**Fig. A.8:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 1.85$ , considerando a distribuição inicial delta.*



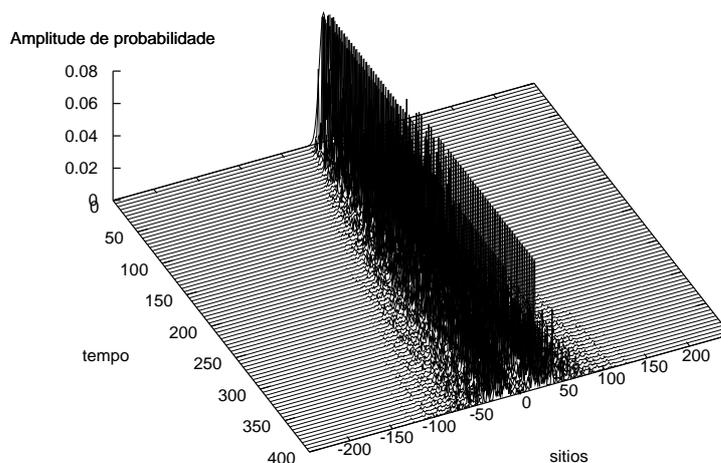
**Fig. A.9:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 1.95$ , considerando a distribuição inicial delta.*



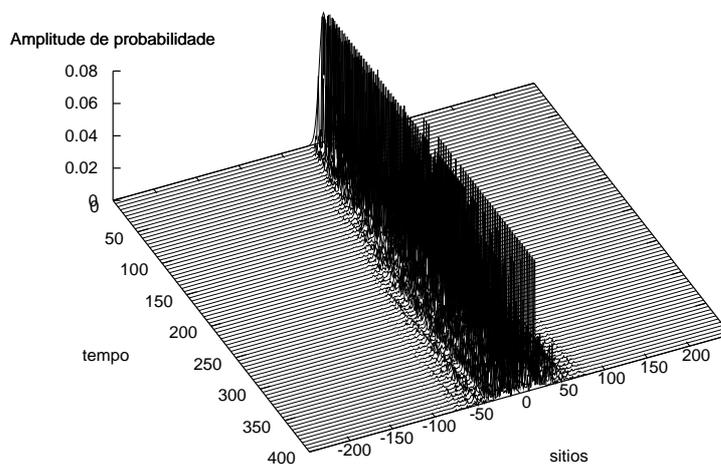
**Fig. A.10:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 2.05$ , considerando a distribuição inicial delta.*



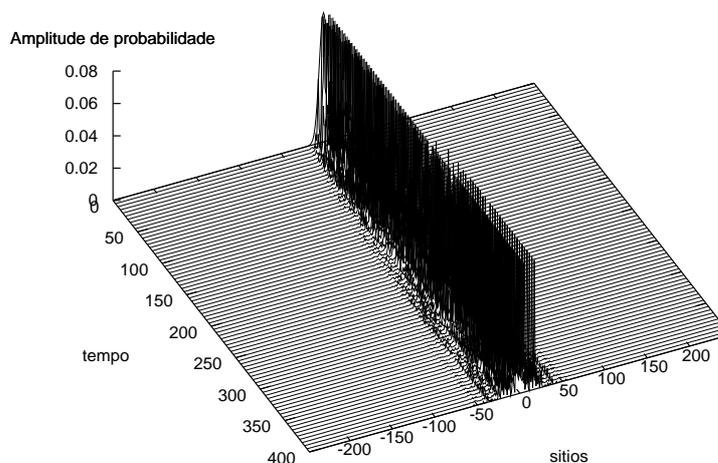
**Fig. A.11:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 2.15$ , considerando a distribuição inicial delta.*



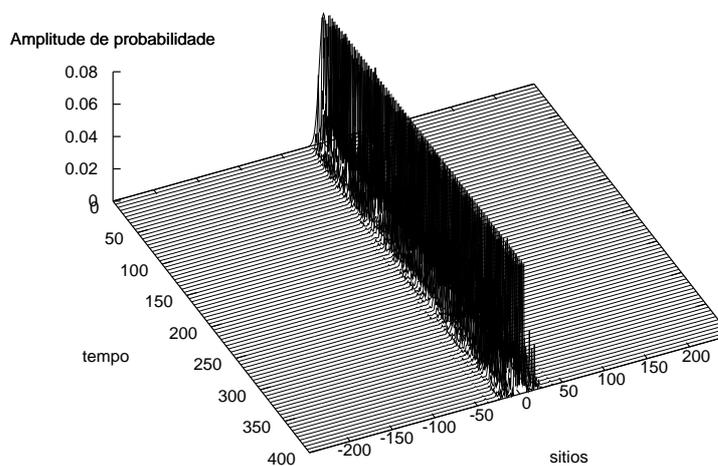
**Fig. A.12:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 1.85$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



**Fig. A.13:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 1.95$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

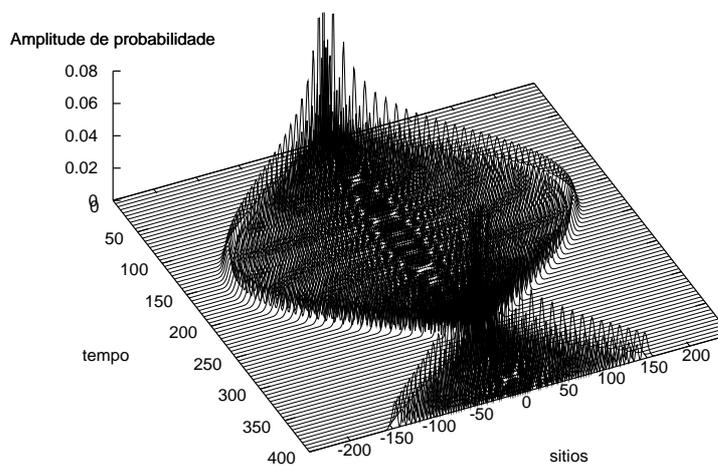


**Fig. A.14:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 2.05$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

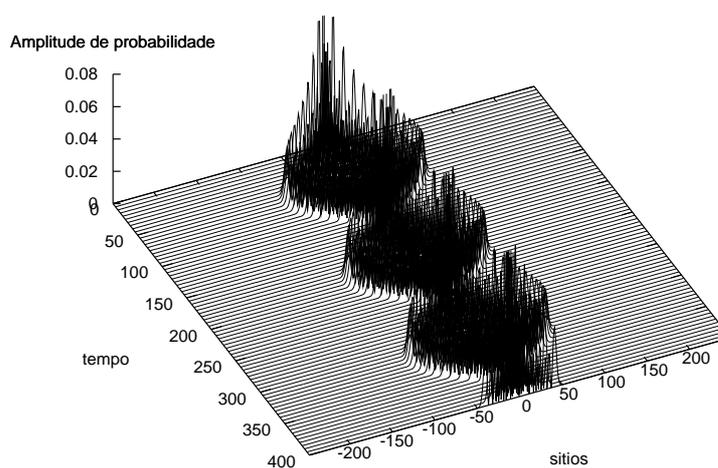


**Fig. A.15:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = F = 0$  e  $\varepsilon = 2.15$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

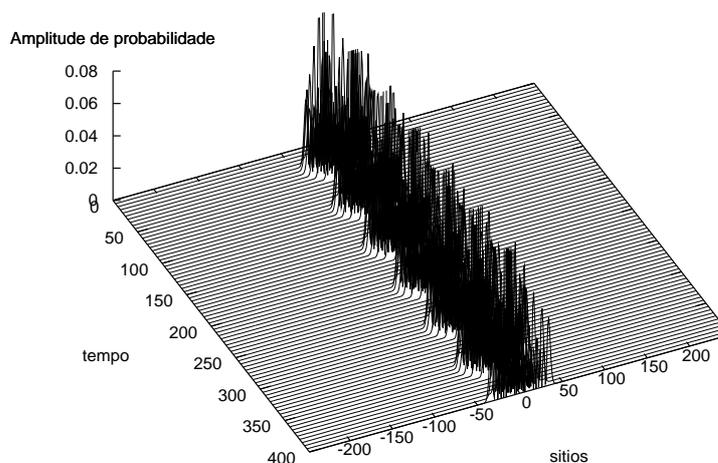
### A.3 Campo elétrico



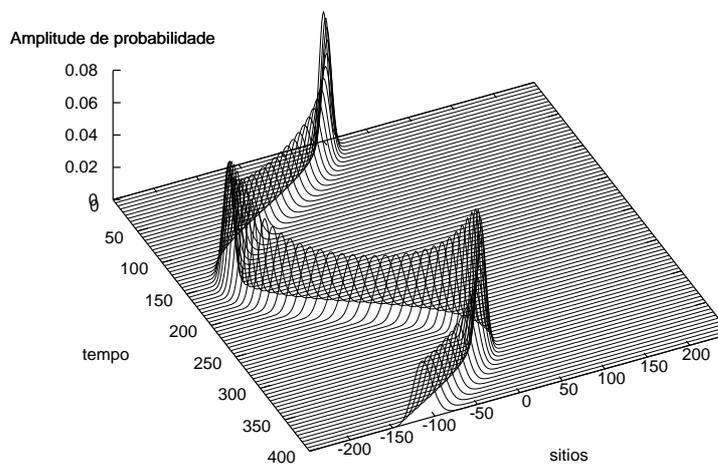
**Fig. A.16:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.02$ , considerando a distribuição inicial delta.*



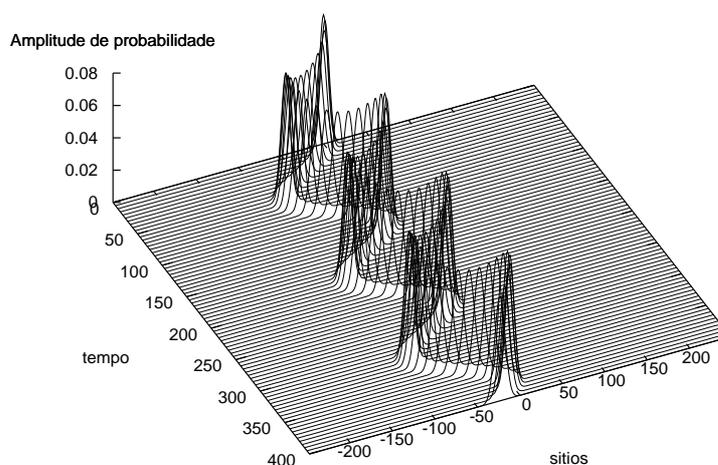
**Fig. A.17:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial delta.*



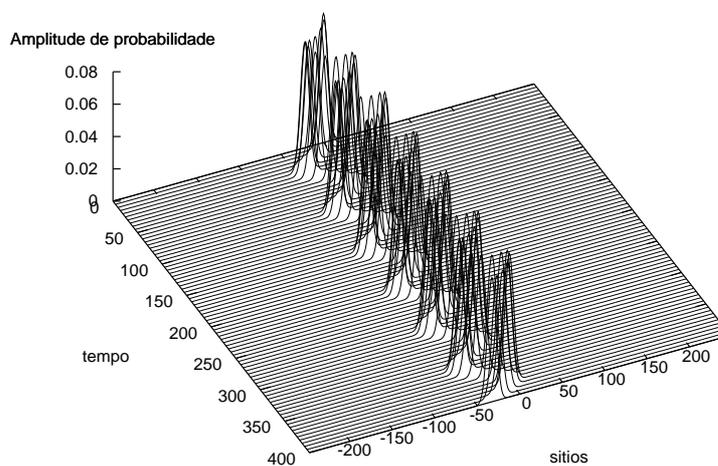
**Fig. A.18:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.1$ , considerando a distribuição inicial delta.*



**Fig. A.19:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.02$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

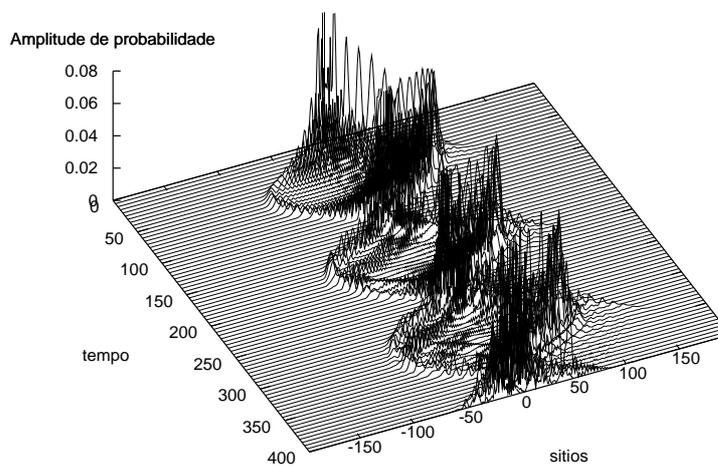


**Fig. A.20:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.05$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

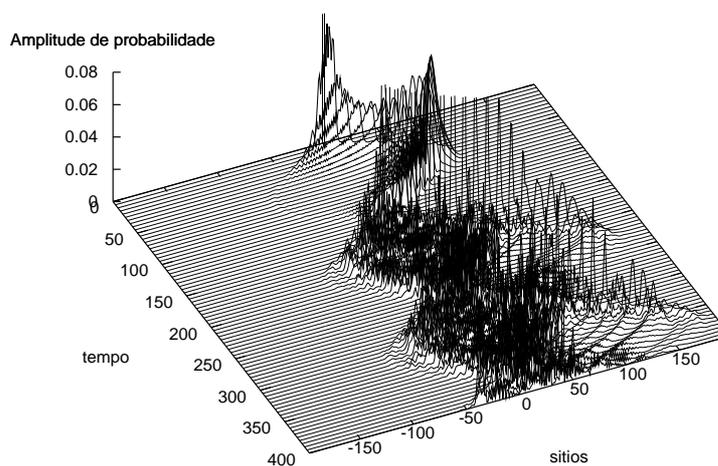


**Fig. A.21:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = \varepsilon = 0$  e  $F = 0.1$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

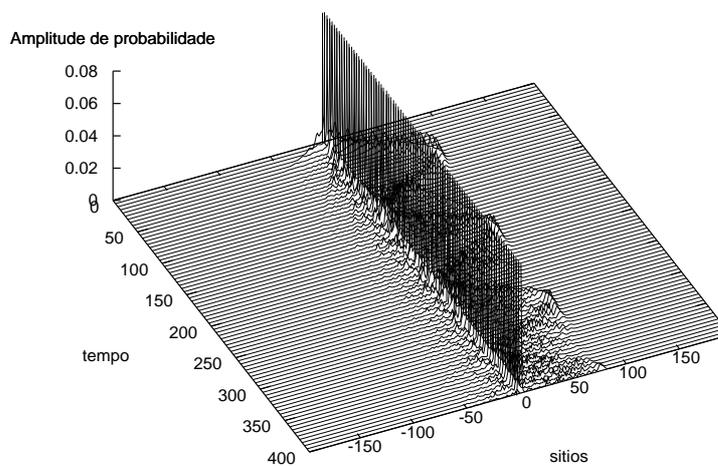
## A.4 Correlação e campo elétrico



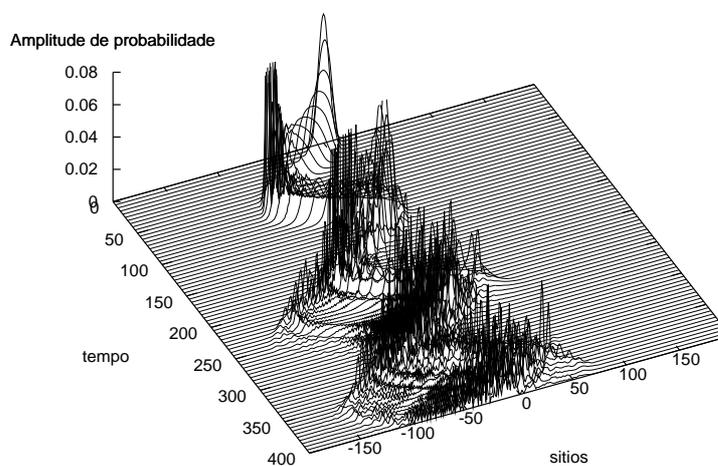
**Fig. A.22:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e  $U = 2.5$ , considerando a distribuição inicial delta.*



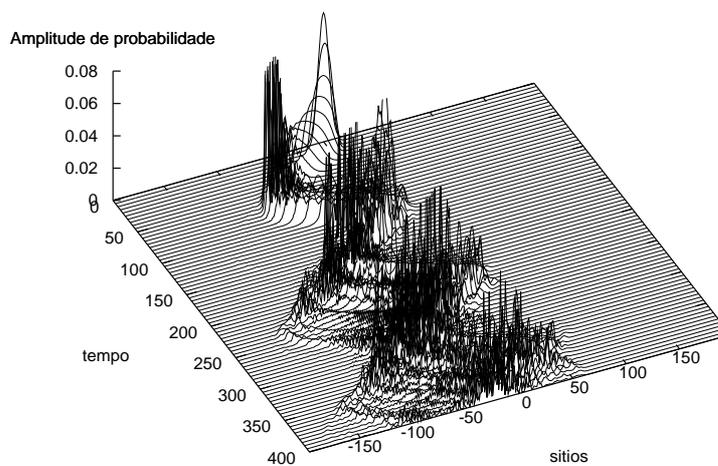
**Fig. A.23:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e  $U = 3.5$ , considerando a distribuição inicial delta.*



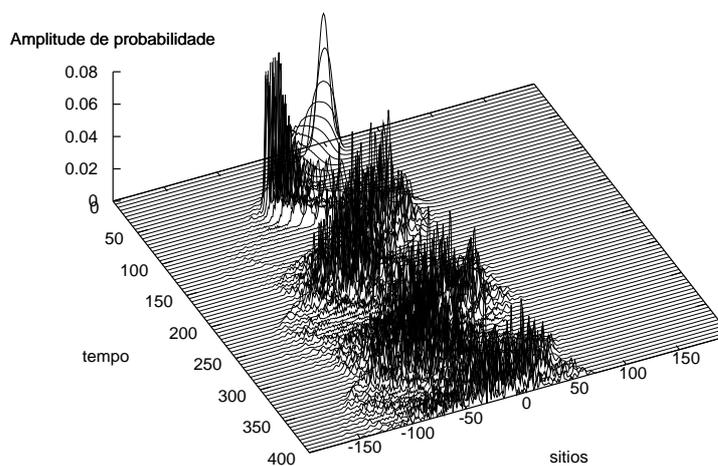
**Fig. A.24:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e  $U = 4.5$ , considerando a distribuição inicial delta.*



**Fig. A.25:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e  $U = 3.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

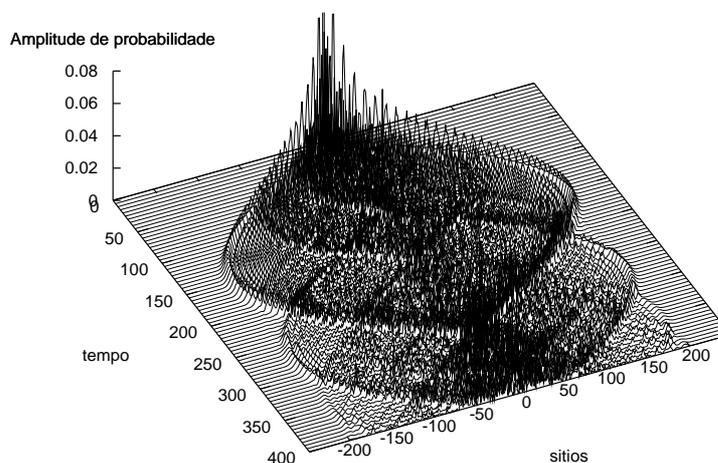


**Fig. A.26:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e  $U = 4.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

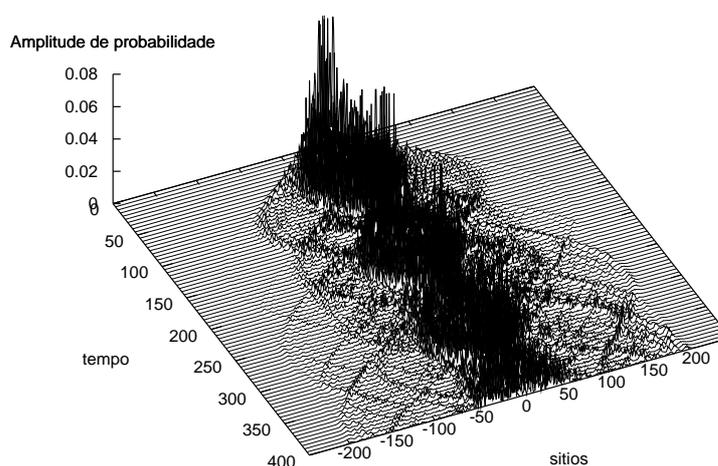


**Fig. A.27:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $\varepsilon = 0$ ,  $F = 0.05$  e  $U = 5.0$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*

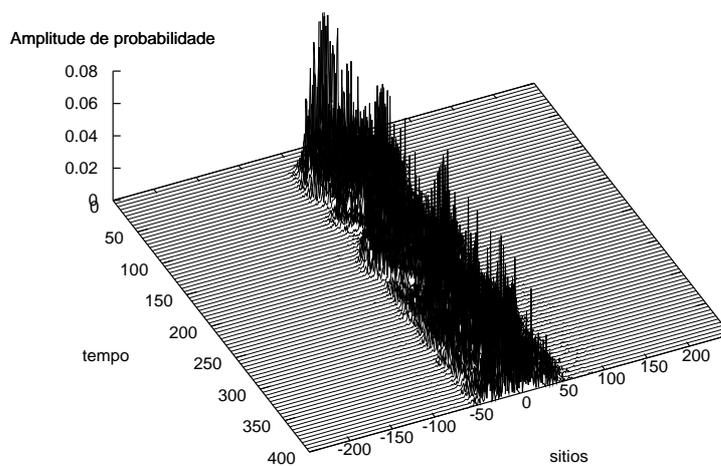
## A.5 Desordem e campo elétrico



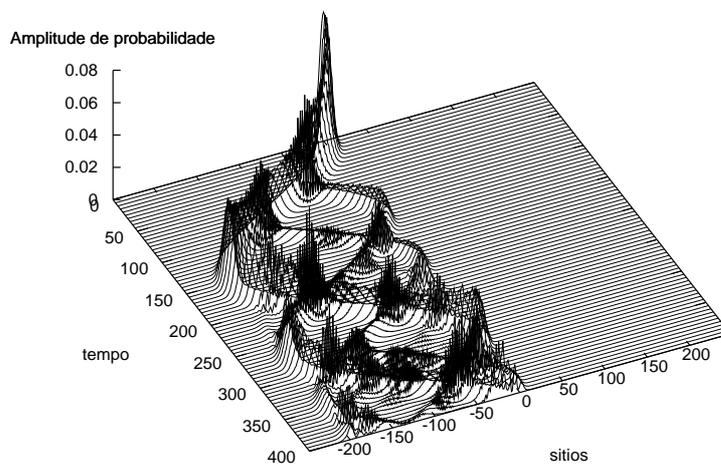
**Fig. A.28:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.1$ , considerando a distribuição inicial delta.*



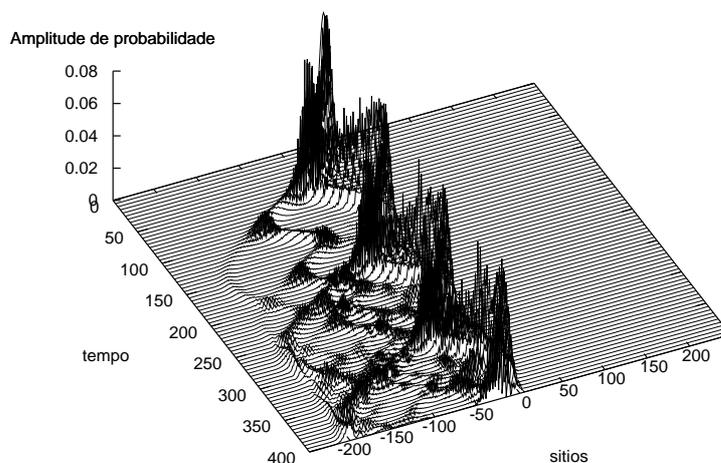
**Fig. A.29:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.3$ , considerando a distribuição inicial delta.*



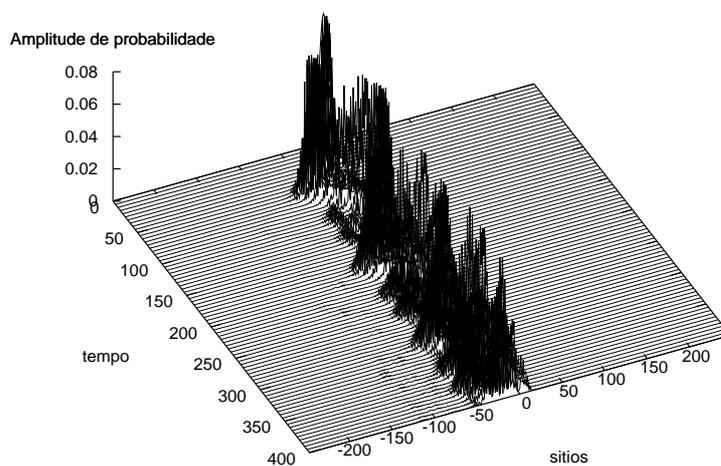
**Fig. A.30:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.5$ , considerando a distribuição inicial delta.*



**Fig. A.31:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.1$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



**Fig. A.32:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.3$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



**Fig. A.33:** *Evolução temporal da amplitude de probabilidade  $|\psi_j(t)|^2$  para os parâmetros  $U = 0$ ,  $F = 0.02$  e  $\varepsilon = 0.5$ , considerando a distribuição inicial gaussiana com  $\sigma = 5$ .*



# Referências Bibliográficas

- [1] MOLINA, M. I. Nonlinearity in materials science *Int. J. Mod. Phys. B* **15** 18 2409-2432 (2001)
- [2] JOHANSSON, M. Effects of nonlinearity on the time evolution of single-site localized states in periodic and aperiodic discrete systems *Phys. Rev. B* **52** 1 231-240 (1995)
- [3] MOLINA, M. Transport of localized and extended excitations in a nonlinear Anderson model *Phys. Rev. B* **58** 19 12547 (1998)
- [4] WEINBERGER, P. John Kerr and his effects found in 1877 and 1878 *Phil. Mag. Lett.* **88** 12 897-907 (2008)
- [5] EISENBERG, H. S. *et. al.* Discrete Spatial Optical Solitons in Waveguide Arrays *Phys. Rev. Lett.* **81** 16 3383 (1998)
- [6] LEDERER, F. *et. al.* Discrete solitons in optics *Phys. Rep.* **463** 1-126 (2008)
- [7] PITAEVSKII, L. P. Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas *Soviet Physics JETP-USSR (Woodbury, New York: American Institute of Physics)* **13** 2 (1961)
- [8] GROSS, E.P. Structure of a quantized vortex in boson systems *Il Nuovo Cimento (Italian Physical Society)* **20** 3 (1961)
- [9] ANDERSON, M. H. *et. al.* Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor *Science* **269** 198 (1995)
- [10] AUBRY, S.; ANDRÉ, G. Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices *Ann. Israel Phys. Soc.* **3** 133-140 (1980)
- [11] KOPIDAKIS, G. *et. al.* Absence of wavepacket diffusion in disordered nonlinear systems *Phys. Rev. Lett.* **100** 084103 (2008)

- [12] SKIPETROV, S. E. Disorder is the new order *Nature* **432** 285 (2004)
- [13] JOHANSSON, M. *et. al.* Transmission thresholds in time-periodically driven nonlinear disordered systems *Europhys. Lett.* **86** 10009 (2009)
- [14] IVANCHENKO, M. V. q-Breathers in discrete nonlinear Schrödinger arrays with weak disorder *JETP Lett.* **89** 3 150-155 (2009)
- [15] BLOCH, F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern *Z. Phys. A* **52** 555 (1928)
- [16] HARTMANN, T. *et. al.* Dynamics of Bloch oscillations *New J. Phys.* **6** 2 (2004)
- [17] WASCHKE, C. *et. al.* Coherent Submillimeter-Wave Emission from Bloch Oscillations in a Semiconductor Superlattice *Phys. Rev. Lett.* **70** 21 3319 (1993)
- [18] LYSENKO, V. G. *et. al.* Direct Measurement of the Spatial Displacement of Bloch-Oscillating Electrons in Semiconductor Superlattice *Phys. Rev. Lett.* **79** 2 301 (1997)
- [19] DEKORSY, T. *et. al.* Electro-optic detection of Bloch oscillations *Phys. Rev. B* **50** 11 8106 (1994)
- [20] ANDERSON, B. P. *et. al.* Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays *Science* **282** 1686 (1998)
- [21] MORSCH, O. *et. al.* Bloch Oscillations and Mean-Field Effects of Bose-Einstein Condensates in 1D Optical Lattices *Phys. Rev. Lett.* **87** 14 140402 (2001)
- [22] KYRIAKIDIS, J.; LOSS, D. Bloch oscillations of magnetic solitons in anisotropic spin-1/2 chains *Phys. Rev. B* **58** 9 5568 (1998)
- [23] LENZ, G. *et. al.* Bloch Oscillations in an Array of Curved Optical Waveguides *Phys. Rev. Lett.* **83** 5 963 (1999)
- [24] MINGALEEV, S. F. *et. al.* Nonlinearity-induced conformational instability and dynamics of biopolymers *Europhys. Lett.* **59** (3) 403-409 (2002)
- [25] PEYRARD, M. Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA *Nonlinearity* **17** R1-R40 (2004)

- [26] DALFOVO, F. *et. al.* Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases *Rev. Mod. Phys.* **71** 3 463 (1999)
- [27] BHATTI, M.; BRACKEN, P. Effects of Nonlinearity in Quantum Mechanics: Example of Bose-Einstein Condensation *Adv. Studies Theor. Phys.* **1** 2 87-98 (2007)
- [28] ALEXANDROV, A. S. Theory of quantum magneto-oscillations in underdoped cuprate superconductors *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 192204 (2008)
- [29] BONILLA, L. L.; GRAHN, H. T. Non-linear dynamics of semiconductor superlattices *Rep. Prog. Phys.* **68** 577-683 (2005)
- [30] SHARF, R.; BISHOP, A. R. Properties of the nonlinear Schrödinger equation on a lattice *Phys. Rev. A* **43** 12 6535-6544 (1991)
- [31] WANNIER, G. H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystal *Phys. Rev.* **52** 191 (1937)
- [32] ZENER, C. A Theory Of The Electrical Breakdown Of Solid Dielectrics *Proc. R. Soc. A* **145** 523 (1934)
- [33] HOLTHAUS, M.; HONE, D. W. Localization Effects in ac-driven Tight-Binding Lattices *Phil. Mag. B* **74** 105 (1996)
- [34] KOWALSKI, K. *et. al.* Coherent states for a quantum particle on a circle *J. Phys. A: Math. Gen.* **29** 4149-4167 (1996)
- [35] CASTRO NETO, A. H. Introduction to Condensed Matter Physics Notas de aula, Boston University, Department of Physics (2008)
- [36] ANDERSON, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices *Phys. Rev.* **109** 5 1492-1505 (1958)
- [37] INGOLD, G. L. Delocalization and Heisenberg's uncertainty relation *Eur. Phys. J. B* **30** 175-179 (2002)
- [38] SCHULTE, T. *et. al.* Dynamics of Bloch oscillations in disordered lattice potentials *Phys. Rev. A* **77** 023610 (2008)
- [39] NAZARENO, H. N. *et. al.* Field-induced localization in Fibonacci and Thue-Morse Lattices *Phys. Rev. B* **51** 6096 (1995)

- 
- [40] NAZARENO, H. N. *et. al.* Two interacting electrons in one-dimensional deterministic aperiodic systems: Fibonacci and Thue-Morse lattices *Phys. Rev. B* **73** 014301 (2006)
- [41] ROATI, G. *et. al.* Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate *Nature* **453** 895 (2008)
- [42] ABRAHAMS, E. *et. al.* Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in 2 dimensions *Phys. Rev. Lett* **42** 673 (1979)
- [43] GARCIA, A. Numerical Methods for Physics, second edition, Prentice Hall do Brasil (2000)
- [44] PRESS, H. W. *et. al.* Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing, second edition, Cambridge University Press, Volume I (2001)
- [45] PIKOVSKY, A. S.; SHEPELYANSKY, D. L. Destruction of Anderson localization by a weak nonlinearity *Phys. Rev. Lett.* **100** 094101 (2008)