

Universidade de Brasília  
Faculdade UnB Planaltina  
Programa de Pós-Graduação em Ciências de Materiais

ANTONIO MARCIO SILVA DUARTE

INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES INICIAIS NO TRANSPORTE ELETRÔNICO  
EM SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS.

BRASÍLIA

2013

Universidade de Brasília  
Faculdade UnB Planaltina  
Programa de Pós-Graduação em Ciências de Materiais

ANTONIO MARCIO SILVA DUARTE

INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES INICIAIS NO TRANSPORTE ELETRÔNICO  
EM SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS.

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Ciências de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Ciências de Materiais da Universidade de Brasília. Área de Concentração: Modelagem e Simulação em Ciência de Materiais. Linha de Pesquisa: Propriedades Eletrônicas e de Transporte em Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito

BRASÍLIA

2013

ANTONIO MARCIO SILVA DUARTE

INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES INICIAIS NO TRANSPORTE ELETRÔNICO  
EM SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Ciências de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Ciências de Materiais da Universidade de Brasília.

Aprovado em 04 de novembro de 2013.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito - Presidente da Banca  
Fup/UnB

---

Prof. Dr. Hugo Nicolas Nazareno - Membro Efetivo, Externo ao Programa  
UnB

---

Prof. Dr. Rodrigo Alves Dias - Membro Efetivo, Externo ao Programa  
UFJF

*A minha Mãe mulher forte, que com  
graça e sabedoria moldou o caráter dos  
sete filhos, obrigado pelas palmadas na  
infância.*

*A meu Pai, homem da roça que com o  
suor e calos alimentou nossos sonhos.  
Aos meus seis Irmãos, com eles aprendi  
a repartir.*

*A Minha Esposa Mulher linda pela qual  
me apaixonei, Ana Gabriella Te Amo.  
A minha filha, Ana Isabel o nenê mais  
lindo que o os meus olhos já  
contemplaram.*

*Ao Caio Julius, o próximo bebê mais  
lindo que o os meus olhos irão  
contemplar.*

*E a todos os meus lindos sobrinhos e  
sobrinhas amo vocês.*

## AGRADECIMENTOS

---

A Deus por ter me dado a condição humana. Ao estado, em nome do povo brasileiro por ter financiado meus estudos. Aos amigos e companheiros de jornadas que encontrei nessa caminhada. Aos gestores, professores e funcionários do PPG-CIMA Programa de Pós-graduação em Ciência de Materiais da FUP/Faculdade UnB Planaltina, o meu muito obrigado. Aos meus orientadores, um abraço e muito obrigado, vocês fazem parte da pequena história da minha vida.

*VAIDADE*

*Sonho que sou a Poetisa eleita,  
Aquela que diz tudo e tudo sabe,  
Que tem a inspiração pura e perfeita,  
Que reúne num verso a imensidade!*

*Sonho que um verso meu tem claridade  
Para encher todo o mundo! E que deleita  
Mesmo aqueles que morrem de saudade!  
Mesmo os de alma profunda e insatisfeita!*

*Sonho que sou Alguém cá neste mundo...  
Aquela de saber vasto e profundo,  
Aos pés de quem a Terra anda curvada!*

*E quando mais no céu eu vou sonhando,  
E quando mais no alto ando voando,  
Acordo **do** meu sonho...E não sou nada!...*

*Florabela Espanca*

## RESUMO

---

AMSD (Antonio Mardcio Silva Duarte). **INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES INICIAIS NO TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS**. 2013. Número de folhas: 40. Dissertação (Mestrado) — Faculdade UnB Planaltina, Universidade de Brasília, Brasília, 2013.

Estudamos o comportamento de um pacote de ondas representado por uma função gaussiana em uma rede cristalina unidimensional. No estudo foram consideradas algumas variações das condições iniciais do sistema. As grandezas largura da gaussiana, campo elétrico, momentum e energia das impurezas foram combinados de forma a gerar os sistemas que estudamos. Os resultados foram obtidos por meio de simulações computacionais construídas em linguagem C com auxílio de bibliotecas numéricas. Os sistemas simulados foram: o caso cristalino, os casos com desordem, a desordem foi atribuída à rede com as seguintes configurações, uma impureza no centro, três impurezas no centro e impurezas distribuídas na rede pelas seqüências de Fibonacci e Thue-Morse, os casos com velocidade inicial do pacote, produzida pelo momentum e os casos com campo elétrico constante.

Descritores: Simulação, Sistemas Quânticos, Desordem.

# ABSTRACT

---

AMSD (Antonio Mardcio Silva Duarte). **INFLUENCE OF INITIAL CONDITIONS ON SHIPPING IN ELECTRONIC ONE-DIMENSIONAL SUSTEMS.** 2013 Number of leaves: 40. Thesis (Master) — Faculdade UnB Planaltina, Universidade de Brasília, Brasília, 2013.

In the present work we study the behavior of a wave packet represented by a Gaussian function in a one-dimensional lattice. We consider some variations of the initial conditions of the system. The quantities Gaussian width, electric field strength, momentum and energy of the impurities were combined in order to produce the systems we studied. The results were obtained by computational simulations built in the C programming language with the help of numerical libraries. The simulated systems were: the crystalline case, cases with disorders — where disorder were assigned to the lattice with the following configurations: one impurity in the center, three impurities in the center, and impurities distributed in the lattice obeying the Fibonacci and the Thue-Morse sequences — cases with packet initial velocity, produced by momentum, and cases with constant electric field.

Keywords: Simulation, Quantum Systems, Disorder.

# LISTA DE FIGURAS

---

- FIGURA 1 Representação da pacote de ondas por uma gaussiana no tempo zero do sistema. 15
- FIGURA 2 Configuração de uma rede com uma impureza no centro, onde  $\epsilon_0$  representa o potencial de uma impureza no sítio, e os outros sítios da rede não possuem impurezas. 17
- FIGURA 3 Configuração de uma rede com três impurezas no centro, onde  $\epsilon = \epsilon_0$  representa o potencial da impureza no sítio central e  $\epsilon = \frac{\epsilon_0}{2}$  os sítios vizinhos. 17
- FIGURA 4 Recorte de uma rede preenchida com a sequencia Fibonacci, onde  $A = 0$  e  $B = \epsilon_0$ . 19
- FIGURA 5 Recorte de uma rede preenchida com a sequencia Thue-Morse, onde  $A = 0$  e  $B = \epsilon_0$ . 20
- FIGURA 6 Evolução temporal da função probabilidade equação (3.20). 22
- FIGURA 7 Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$  para  $E = 0.0, \epsilon = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, k = 0.0$  e  $\sigma = 0.0$ , para a distribuição Fibonacci. 23
- FIGURA 8 Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$  para  $E = 0.0, \epsilon = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, k = 0.0$  e  $\sigma = 0.0$ , para a distribuição Thue-Morse. 23
- FIGURA 9 Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação, do centróide e da energia para validar a simulação de uma impureza.  $k$  variando de 0.0 a 0.5. 25
- FIGURA 10 Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação, do centróide e da energia para validar a simulação de uma impureza.  $k$  variando de 0.6 a 1.0. 25

- FIGURA 11 Representação gráfica do comportamento do coeficiente angular das funções participação e centróide, da constante linear para a energia e do coeficiente que acompanha o termo quadrático da função de grau dois, para o  $msd$ , todos em relação ao momentum  $k$ . 26
- FIGURA 12 Evolução temporal da probabilidade para o caso com uma impureza. Sistema com velocidade dada por um momentum  $k = 0.0$  27
- FIGURA 13 Evolução temporal da probabilidade para o caso com uma impureza. Sistema com velocidade dada por um momentum  $k = 0.0$  27
- FIGURA 14 Evolução temporal da probabilidade para o caso com uma impureza. Sistema com velocidade dada por um momentum  $k = 0.0$  28
- FIGURA 15 Relação entre energia, largura da gaussiana e momentum. 29
- FIGURA 16 Evolução temporal do centróide, do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação e da energia, com sigma  $\sigma$  variando de 0.0 a 1.0, com passos de 0.1 em 0.1. O sistema apresenta  $\epsilon = k = E = 0$ . 30
- FIGURA 17 Evolução temporal do centróide, do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação e da energia, com sigma  $\sigma$  variando de 1.1 a 2.0, com passos de 0.1 em 0.1. O sistema apresenta  $\epsilon = k = E = 0$ . 30
- FIGURA 18 Evolução temporal do centróide, do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação e da energia, com sigma  $\sigma$  variando de 2.1 a 3.0, com passos de 0.1 em 0.1. O sistema apresenta  $\epsilon = k = E = 0$ . 31
- FIGURA 19 Oscilações de Bloch na rede cristalina 32
- FIGURA 20 Oscilações de Bloch na rede cristalina 32
- FIGURA 21 Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  $E = 0.1$ . 33
- FIGURA 22 Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  $E = 0.5$ . 34

- FIGURA 23 Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  
 $E = 1.0$ . 34
- FIGURA 24 Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  
 $E = 2.0$ . 35
- FIGURA 25 Representação de sítios em ressonância tripla. 36
- FIGURA 26 Representação de sítios em ressonância tripla. 37

# SUMÁRIO

---

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	TEOREMA DE BLOCH	4
1.2	AS FUNÇÕES DE WANNIER	6
2	MODELO TIGHT-BINDING	7
2.1	OSCILAÇÕES DE BLOCH NO CAMPO ELÉTRICO	10
3	MÉTODO	12
3.1	MEDIDAS E CONDIÇÃO INICIAL DO SISTEMA	15
3.2	TIPOS DE IMPUREZAS	16
4	RESULTADOS	21
4.1	RESULTADOS NO SISTEMA CRISTALINO	21
4.2	RESULTADOS NO SISTEMA COM DESORDEM	22
4.3	RESULTADOS NO SISTEMA COM DESORDEM E VELOCIDADE	23
4.4	RESULTADOS NO SISTEMA COM VARIAÇÃO DE GAUSSIANA	29
4.5	RESULTADOS NO SISTEMA COM DESORDEM E CAMPO ELÉTRICO DC	32
4.6	RESULTADOS COM RESSONÂNCIA	36
5	CONCLUSÃO	38
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	39

# 1 INTRODUÇÃO

---

O estudo das diversas propriedades dos materiais é de grande importância para o entendimento de seus comportamentos e de suas inúmeras aplicações. Pode-se dividir estas propriedades em seis categorias principais: mecânicas, térmicas, elétricas, magnéticas, ópticas e de degradação. Em cada uma destas categorias, pode-se estudar como o material responde a estímulos externos.

Neste trabalho, será estudado propriedades elétricas de sistemas unidimensionais sob a ação de um campo elétrico externo e sob o efeito de impurezas na rede ou uma estrutura aperiódica do potencial da rede. É continuidade aos trabalhos das referências [1–4], onde será investigado o comportamento no transporte eletrônico com condições iniciais variadas. O pacote eletrônico será representado no sistema por uma função de onda na forma de uma gaussiana e por um determinado momentum, momentum que poderá ser relacionado com a velocidade inicial do pacote.

Pode-se questionar o porquê de estudar sistemas uni-dimensionais se o nosso mundo é claramente formado por sistemas tridimensionais. Existe várias razões para isto, pode-se aqui focar duas delas: 1<sup>o</sup>) Para estudar sistemas mais complexos, é interessante iniciar este estudo a partir de sistemas mais simples, e sistemas unidimensionais são por si só mais simples do que um sistema tridimensional. 2<sup>o</sup>) Hoje já existe a confecção de nanofios de silício, de carbono, e de diversos outros tipos de materiais, sistemas unidimensionais por natureza.

Para entender as propriedades elétricas, ou seja, como os materiais respondem quando são aplicados campos elétricos externos, a teoria de bandas será básica para este entendimento. Em resumo, a teoria de bandas consiste em considerar os níveis energéticos dos átomos ligados em um sólido como um conjunto de níveis muito próximos formando uma faixa de energias possíveis a serem assumidas pelo elétron, por isso o nome bandas. O número de elétrons que devem preencher estas bandas e como elas são preenchidas, pode-se dividir os materiais em condutores, semi-condutores e isolantes[5–8].

A teoria de bandas foi desenvolvida por Felix Bloch em 1928[9], neste trabalho ele utilizou do método *tight-binding* (ligações fortes) para a descrição de um potencial periódico unidimensional agindo sobre um elétron. Resolvendo a equação de Schrödinger por intermédio da análise de Fourier e da Teoria de Grupos, descobriu o famoso teorema que leva o seu nome: *Teorema de Bloch*. Nesse teorema a função de onda eletrônica é dada por:  $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$ , onde  $u(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u(\mathbf{r})$ , sendo  $\mathbf{a}$  o parâmetro de rede (período da rede),  $\mathbf{k}$  é o vetor de ondas e  $\mathbf{r}$  é a coordenada do elétron, ou seja, a função de onda reflete a periodicidade da estrutura cristalina.

A aplicação de um campo elétrico sobre uma partícula sujeita a um potencial periódico, contrariamente ao que poderia se pensar classicamente, move-se de maneira periódica, oscilações estas conhecidas como *Oscilações de Bloch*, cuja período é dado por  $T = \hbar G / eE$ , onde  $G$  é um vetor da rede recíproca. Neste trabalho, será verificado estas oscilações de Bloch independente das condições iniciais do pacote eletrônico.

Em um trabalho pioneiro de Anderson [10] o problema de ausência de difusão em redes aleatórias tem o seguinte critério: Se no tempo  $t = 0$  tem-se um portador localizado em um sítio particular, qual é a probabilidade de encontrá-lo neste sítio após um longo período de tempo? Diz-se que há difusão quando em um tempo relativamente longo ( $t \rightarrow \infty$ ) a amplitude da função de onda neste sítio tende a zero. Neste trabalho, será estudado como as condições iniciais interferem na difusão ou na localização do pacote eletrônico quando o mesmo está sob uma estrutura com potenciais aperiódicos e com impurezas, além é claro, sob a ação de campos externos.

Em seguida, nesta dissertação, será mostrado a descrição do Teorema de Bloch, da base de Wannier como uma base para descrição dos estados eletrônicos, do modelo de *Tight-binding*, das oscilações de Bloch quando aplicado um campo elétrico e sobre o método de diagonalização de matrizes para solução da Equação

de Schrödinger independente do tempo. Depois será mostrado quais os sistemas que serão estudados e quais as medidas que serão analisadas nas diversas situações. Em seguida serão mostrados os resultados das simulações efetuadas, a sua análise e conclusões.

## 1.1 TEOREMA DE BLOCH

Para definirmos as funções de Bloch vamos considerar uma rede com geometria unidimensional, onde os elétrons apresentam um potencial  $V(x)$ , com um período na ordem do parâmetro de rede  $a$ . Nessas condições  $V(x + a) = V(x)$ . O hamiltoniano para esse sistema é

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (1.1)$$

onde no primeiro termo,  $\hbar$  é a constante de Planck  $h/2\pi$  e  $m$  é a massa do elétron livre, representando assim a componente cinética do hamiltoniano. A equação de Schrödinger independente do tempo para esse sistema cristalino com potencial periódico é da forma

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.2)$$

Os autovalores do hamiltoniano  $\hat{H}$  são os valores permitidos de energia para a equação (1.2) e a função  $\psi(x)$  é a autofunção do hamiltoniano.

Para que as funções sejam funções de Bloch elas devem satisfazer as operações de translação. Seja  $\hat{T}$  um operador de translação, aplicando-o a uma a função  $f(x)$ , ele somará um período ao argumento da função, ou seja,  $\hat{T}f(x) = f(x + a)$ . Aplicando o operador  $\hat{T}$  na equação (1.2) temos que

$$\begin{aligned} \hat{T}\hat{H}\psi(x) &= \hat{T} \left( -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{d(x+a)^2} \psi(x+a) + V(x+a)\psi(x+a) \\ &= -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{d(x)^2} \psi(x+a) + V(x)\psi(x+a) \\ &= \hat{H}\hat{T}\psi(x) \end{aligned} \quad (1.3)$$

A equação (1.3) mostra que os operadores  $\hat{H}$  e  $\hat{T}$  comutam, com isso temos um conjunto de funções  $\psi(x)$  que são autofunções dos operadores  $\hat{H}$  e  $\hat{T}$ . Essas funções são as funções de Bloch.

F. Bloch demonstrou que a solução da equação de Schrödinger para um potencial periódico é da forma

$$\psi_k(x) = u_k(\mathbf{r})e^{ik \cdot \mathbf{r}}, \quad (1.4)$$

onde  $u_k(r)$  apresenta período igual ao da rede cristalina.

Quando as funções  $\psi_k$  são funções não degeneradas, ou seja, quando não há outras funções com o mesmo número de onda  $k$ . Considerando uma rede no formato de um anel de comprimento  $Na$ . Por conta da simetria do anel, podemos procurar soluções na forma:

$$\psi(x + a) = C\psi(x), \quad (1.5)$$

onde  $C$  é uma constante. E para o caso de percorrer todo o anel temos:

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

então podemos dizer que  $C$  é uma das  $N$  raízes da unidade, dado por

$$C = e^{i2\pi s/N} ; s = 0, 1, 2, \dots, N - 1$$

Assim temos que:

$$\psi(x) = u_k(x)e^{i2\pi sx/Na}, \quad (1.7)$$

e considerando  $k = \frac{2\pi s}{Na}$ , teremos o resultado proposto por Bloch [9].

O período dessas funções é de  $\frac{2\pi}{a}$ , isso nos dá a condição de analisar a função dentro do intervalo de  $-\frac{\pi}{a}$  a  $\frac{\pi}{a}$ , esse intervalo é conhecido na literatura de física do estado sólido como primeira zona de Brillouin [11–13].

Definindo a energia  $E_{j,k}$ , com os índices  $j$  e  $k$ , sendo  $j$  o número que representa as bandas de energia e a função de Bloch para cada  $j$  fixo e  $k$  variando. Com isso pode-se mostrar que para cada banda de energia há uma função de Bloch associada os valores de  $k$  primeira zona de Brillouin.

## 1.2 AS FUNÇÕES DE WANNIER

A série de Fourier é uma forma de escrever funções periódicas como uma soma de senos e cossenos de períodos múltiplos da frequência fundamental. Se temos uma função  $f(x)$ , real ou complexa podemos representa um intervalo dessa função pela série de Fourier que na sua forma complexa é

$$f(x) = \sum_n C_n e^{i2\pi nx/a}, \quad (1.8)$$

onde,  $n$  pertence ao conjunto dos números inteiros, os  $C_n$  são os coeficiente de Fourier e  $a$  é o período da função.

Para calcular os coeficiente de Fourier ( $C_n$ ) da função usamos a expressão matemática dada por

$$C_n = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) e^{-i2\pi nx/a} dx. \quad (1.9)$$

Há muitas maneiras de se escrever as funções de Wannier em física do estado sólido, a mais simples é quando considera-se um cristal perfeito e uma única banda, dessa forma representa-se os estados de Bloch na forma da equação (1.10),

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

onde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  tem a mesma periodicidade do cristal. Usando a equação (1.10), podemos escrever as funções de Wannier na forma [11–13]

$$\varphi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.11)$$

onde  $\mathbf{R}$  é um vetor do espaço real e  $N$  e o numero de células primitivas do cristal. Como na maioria das vezes  $N$  é um numero muito grande o somatorio em  $\mathbf{k}$  na primeira zona de Brillouin para o caso em três dimensões é da forma

$$\sum_{\mathbf{k}} = \frac{N}{\Omega} \int_{BZ} d^3\mathbf{k}, \quad (1.12)$$

onde  $\Omega$  representa o volume na primeira zona de Brillouin e  $BZ$  a integral sobre a mesma.

## 2 MODELO TIGHT-BINDING

---

Em uma cadeia de átomos os elétrons sofrem interação de varias formas, dentre essas formas podemos citar, a interação elétron-elétron e a interação dos íons da rede com os elétrons. Se considerarmos todas as interações o problema de descrever a dinâmica do elétron no tempo se torna de difícil solução, no entanto se reduzirmos as interações é possível solucionar o problema e investigar propriedades dos materiais. Nesse contexto, o método das ligações fortes (*tight – binding*) é usado para investigar problemas da física do estado sólido. Para representar os estados eletrônicos, no modelo de ligação forte adota-se como critério que o elétron é representado por um conjunto de funções de onda que têm superposição das funções de onda de um elétron localizado em cada sítio da rede.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^N C_n \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (2.1)$$

Usando a notação de Dirac, o estado quântico pode ser descrito como uma soma de estados localizados em cada sítio.

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N C_n |n\rangle, \quad (2.2)$$

onde  $|n\rangle$  corresponde ao estado de um orbital ligado ao sítio  $n$ , e  $|C_n|^2$  é a probabilidade de encontrar o elétron no sítio  $n$ .

Pode-se provar que para um hamiltoniano que leve em conta o termo cinético e potencial periódico da rede, tem um formato geral do tipo:

$$\hat{H} = -V \sum_{n=0}^N (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) + \sum_{n=0}^N \epsilon_n |n\rangle \langle n|, \quad (2.3)$$

onde  $V$  é o gasto energético que um elétron tem para passar de um sítio  $n$  da rede para um sítio  $n+1$  ou  $n-1$  (caso unidimensional). Esse gasto é chamado de termo de pulo ou termo *hopping* e  $\epsilon_n$  está relacionado com a energia em cada sítio. Os valores que  $\epsilon_n$  assume está relacionado com o tipo de rede que desejamos

trabalhar. Mais adiante, será descrito os 4 tipos de sistema de energia no cristal que foi trabalhado neste trabalho.

Para o hamiltoniano da equação (2.3) aplicado ao equação Schrödinger temos como solução a equação (2.4)

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^N C_j |j\rangle, \quad (2.4)$$

onde o modulo de  $C_j^2$  da a probabilidade de encontrar o elétron no sítio  $j$ .

Philip W. Anderson foi pioneiro no estudo da localização dinâmica em semicondutores por meio de desordem aleatória. Essa desordem é entendida como impurezas no cristal. As impurezas são vacâncias ou átomos diferentes dos que compõem a estrutura da rede cristalina. Nesse trabalho a desordem foi simulada por meio de series determinística. A serie de Fibonacci e a serie de Thue-Morse. Nesse contexto apresentamos o hamiltoniano (*tight – binding*) para um sistema com desordem dado por

$$\hat{H} = -V \sum_{j=0}^N (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|) + \sum_{j=0}^N \epsilon_j |j\rangle \langle j|, \quad (2.5)$$

onde  $\epsilon$  é a energia em cada sítio que caracteriza a desordem da rede cristalina. A equação de Schrödinger para o hamiltoniano da equação (2.5) é da forma

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle, \quad (2.6)$$

Silva[14] demonstrou a equação (2.6) que apresenta para redes unidimensionais com desordem a solução

$$i\hbar \frac{dC_j}{dt} = -V(C_{j+1} - C_{j-1}) + \epsilon_j C_j. \quad (2.7)$$

Alem da desordem  $\epsilon_j$  mostrada acima também investigamos o comportamento da introdução de um campo elétrico externo constante. O hamiltoniano o termo para a energia associada a aplicação do campo elétrico é dada por

$$\hat{H} = \sum_{j=0}^N eEa_j |j\rangle \langle j|. \quad (2.8)$$

Acrescentando a desordem a equação (2.8) temos

$$\hat{H} = -V \sum_{j=0}^N (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|) + \sum_{j=0}^N eEa_j |j\rangle \langle j| + \sum_{j=0}^N \epsilon_j |j\rangle \langle j|, \quad (2.9)$$

onde esse é hamiltoniano (*tight - binding*) que apresenta campo elétrico e desordem, Silva[14] também demonstrou a equação Schrödinger para esse sistema, que é da forma

$$i\hbar \frac{dC_j}{dt} = -V(C_{j+1} - C_{j-1}) + \epsilon_j C_j + eEa_j C_j. \quad (2.10)$$

Nesse trabalho a equação Schrödinger linear e discreta foi simulada com um tempo característico dado por

$$\tau = \frac{Vt}{\hbar}, \quad (2.11)$$

substituindo a equação (2.11) na equação (2.10) reescrevemos a equação Schrödinger na forma

$$-\frac{dC_j}{d\tau} = -(C_{j+1} - C_{j-1}) + \frac{\epsilon_j}{V} C_j + \frac{eEa_j}{V} C_j, \quad (2.12)$$

dessa forma as medidas de desordem  $\epsilon_j$  e campo elétrico  $E$  seram dadas em termos do hopping.

## 2.1 OSCILAÇÕES DE BLOCH NO CAMPO ELÉTRICO

Considere uma rede unidimensional com um potencial periódico  $V(x)$  e um campo elétrico  $E$  externo aplicado ao longo da rede. Nessas condições o campo elétrico produz um desnível no potencial dos átomos da rede. O hamiltoniano desse sistema é da forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + eEx, \quad (2.13)$$

onde,  $e$  é a carga do elétron e  $E$  é o campo elétrico dc. Nesse sistema a função de onda apresenta oscilações com um período característico, esse período é chamado de período de Bloch [14].

Abaixo vamos demonstra de forma suscita o período de Bloch

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE \quad (2.14)$$

a equação (2.14) relaciona o momentum  $\hbar k$  com o campo elétrico, resolvendo a equação (2.14) temos :

$$\begin{aligned} \hbar \frac{dk}{dt} &= -eE \\ \hbar \int_0^k dk &= -eE \int_0^t dt \\ \hbar k &= -eEt \\ k &= \frac{-eEt}{\hbar}, \end{aligned}$$

dessa forma  $k$  é dado por

$$k = \frac{-eEt}{\hbar}. \quad (2.15)$$

A velocidade do elétron em função de  $k$  é dado por [11]

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk}. \quad (2.16)$$

A relação de dispersão em função de  $k$  é definida como

$$\epsilon(k) = A \cos(ka), \quad (2.17)$$

onde  $A$  é uma constante e  $a$  é o parâmetro de rede. A derivada da equação (2.17)

em função de  $k$  é

$$\frac{d\epsilon}{dk} = -Aa \sin(ka),$$

substituindo na equação (2.16) temos

$$v(k) = -\frac{Aa}{\hbar} \sin(ka). \quad (2.18)$$

A posição é dada por

$$x(t) = \int v(k(t)) dt, \quad (2.19)$$

resolvendo a integral da equação (2.19) temos

$$x(t) = -\frac{A}{eE} \cos\left(\frac{aeE}{\hbar} t\right), \quad (2.20)$$

onde, a equação (2.19) é solução da equação (2.18). Da equação (2.20) escrevemos a frequência angular da onda na forma

$$\omega = \frac{aeE}{\hbar}, \quad (2.21)$$

onde  $\omega$  é a frequência angular da onda, com isso temos

$$\omega = \frac{2\pi}{T}, \quad (2.22)$$

onde,  $T$  é o período de oscilação da onda, dessa forma escrevemos

$$\begin{aligned} \frac{eEa}{\hbar} &= \frac{2\pi}{T} \\ T &= \frac{2\pi\hbar}{eEa}. \end{aligned}$$

Dessa forma escrevemos o período de Bloch  $T_B$  como

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{eEa}. \quad (2.23)$$

Na forma adimensional podemos escrever o período como simplificando temos

$$\tau_B = \frac{2\pi}{\eta}, \quad (2.24)$$

onde  $\eta = \frac{eEa}{V}$ .

### 3 MÉTODO

---

Para solução do problema foi utilizado o método da diagonalização de matrizes. O método consiste em escrever a função de onda como um vetor cujo as componentes são os coeficiente da matriz.

$$\psi(x) = \sum C_n \phi(x - na) \quad (3.1)$$

$$f = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ C_i \\ \vdots \\ C_{n-1} \\ C_n \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi, \quad (3.3)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} f = Mf, \quad (3.4)$$

onde M representa o hamiltoniano, considerando  $\tau = \frac{Vt}{\hbar}$  temos  $M_{nn} = \epsilon_n - eaE_n$  e o termo da diagonal secundária, o termo de hopping  $M_{nn+1} = M_{nn-1} = -V$  e

$$M = \begin{pmatrix} \epsilon_1 + \eta & -1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & \epsilon_2 + 2\eta & -1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \epsilon_3 + 3\eta & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \epsilon_j + j\eta & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \epsilon_{n-1} + (n-1)\eta & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & -1 & \epsilon_n + n\eta \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

A solução formal de

$$-i\dot{f} = Mf \quad (3.6)$$

é

$$f = e^{-iMt} f_0 \quad (3.7)$$

se encontramos os autovalores e os autovetores da matriz  $M$  tal que  $\lambda_j$  sejam os autovalores e  $f_j$  os autovetores podemos reescrever a solução na forma

$$Mf_0 = \lambda_j f_j. \quad (3.8)$$

$D$  é a matriz diagonal tal que  $D_{jj} = \lambda_j$  e  $R$  é a matriz formada pelos autovetores

$$R = (f_1 \ f_2 \ f_3 \ \cdots \ f_j \ \cdots \ f_{n-1} \ f_n) \quad (3.9)$$

e  $R^\dagger$  é a transposta definida por

$$R^\dagger = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

onde temos

$$RR^\dagger = R^\dagger R = \mathbb{1} \quad (3.11)$$

$$\mathbf{MR} = \sum_j \lambda_j \mathbf{f}_j \mathbf{R} \quad (3.12)$$

$$\mathbf{R}^+ \mathbf{MR} = \sum_j \mathbf{f}_j \lambda_j \mathbf{f}_j = \lambda_{jj} = \mathbf{D} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{RDR}^+ = \mathbf{M} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{f} = e^{\mathbf{RDR}^+ t} \mathbf{f}_0 \quad (3.15)$$

reescrevendo temos

$$\mathbf{f} = \mathbf{R} e^{i\mathbf{D}t} \mathbf{R}^+ \mathbf{f}_0 \quad (3.16)$$

### 3.1 MEDIDAS E CONDIÇÃO INICIAL DO SISTEMA

Em nossas simulações o elétron foi representado por um pacote de ondas localizado no sítio  $x_0$ , onde  $x_0$  é o sítio central da rede. Esse pacote assume o formato de uma gaussiana,

$$C_j = A e^{-(x_j - x_0)^2 / 2\sigma^2} e^{-i\pi k j / a} \quad (3.17)$$

A equação (3.17), define a condição inicial da dinâmica do sistema, os parâmetros  $A$ ,  $x_0$  e  $\sigma$ , são, o parâmetro de normalização da curva, como a posição do centro, onde se localiza o máximo da função, e a largura da gaussiana. Essas são as características da curva de sino conhecida como gaussiana.

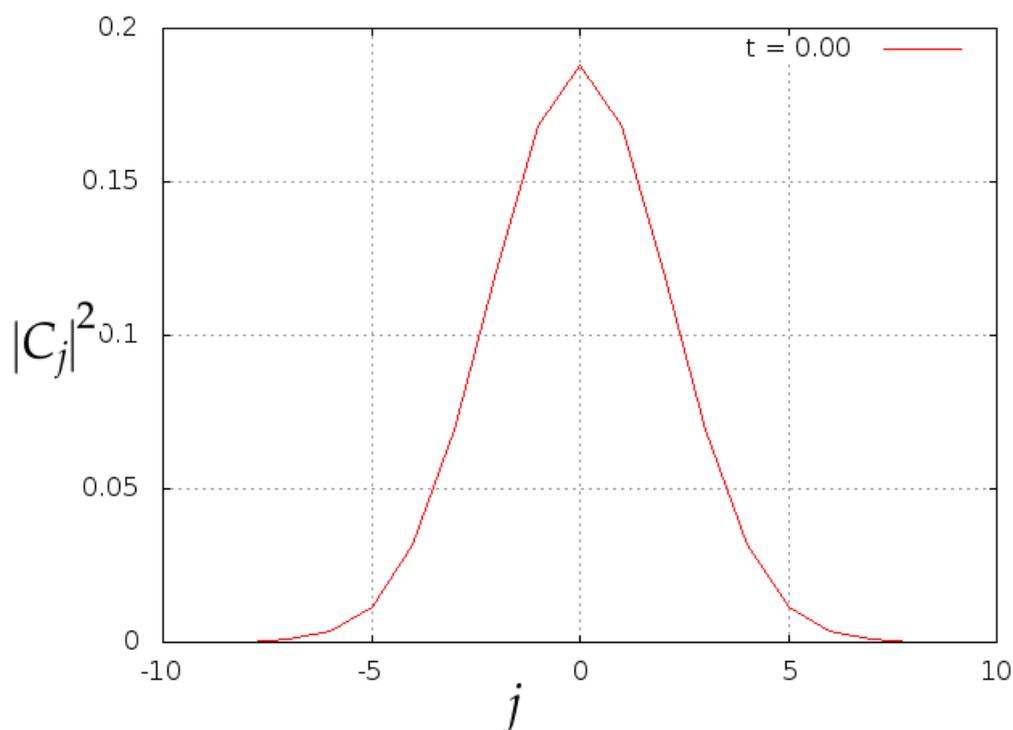


FIGURA 1 – Representação da pacote de ondas por uma gaussiana no tempo zero do sistema, com  $x = 0$  e  $\sigma = 2$

A figura 1 apresenta o pacote de ondas em formato gaussiana no tempo zero para uma simulação. Nela é possível ver claramente que o pacote sai do centro da rede com o formato de uma gaussiana.

Para investigar o propriedades do pacote de ondas no sistema usamos algumas funções, o desvio quadrático médio, mais conhecido como *msd* (*mean square displacement*), o centróide nos dá a evolução do ponto médio da distribuição

gaussiana, a função participação, sendo que essa cresce a medida que o pacote se espalha na rede, a norma e a energia foram usadas na simulação como uma forma de validar resultados.

Com as grandezas citadas acima realiza-se as seguintes medidas na simulação: a norma definida por

$$Norma = \sum_n |C_n|^2, \quad (3.18)$$

O centroide definido como

$$\langle n \rangle = \sum_n |C_n|^2 n, \quad (3.19)$$

a equação (3.19) nos dá o comportamento do centro do pacote de ondas. O desvio quadrático médio é definido como

$$\langle n^2 \rangle = \sum_n |C_n|^2 n^2. \quad (3.20)$$

A equação (3.20) nos dá segundo [14, 15], uma visão clara do problema da localização dinâmica. A participação, que informa quantos sítios participaram da simulação é dada por

$$Part = \frac{1}{\sum_n |C_n|^4}. \quad (3.21)$$

A energia do sistema foi definida como

$$E = \sum_n |C_n|^2 \epsilon_n - V \sum_n (C_{n+1}^* C_j + C_n^* C_{n+1} + C_{n-1}^* C_n + C_n^* C_{n-1}). \quad (3.22)$$

onde  $V$  é o termo de hopping, ou termo de pulo.

## 3.2 TIPOS DE IMPUREZAS

A desordem do sistema foi construída simulando a distribuição de impurezas na estrutura da rede cristalina. As impurezas foram distribuídas da seguinte forma: uma impureza no sítio central, para o primeiro caso. No segundo caso foram distribuídas três impurezas nos sítios centrais, sendo que as impurezas vizinhas a impureza do sítio central, foi atribuídas a eles metade da energia da impureza do sítio central. O caso três e o caso quatro as impurezas foram distribuídas por series, a serie de Fibonacci e a serie de Thue-Morce.

A Figura 2 mostra uma rede cristalina com uma impureza, nesse sistema

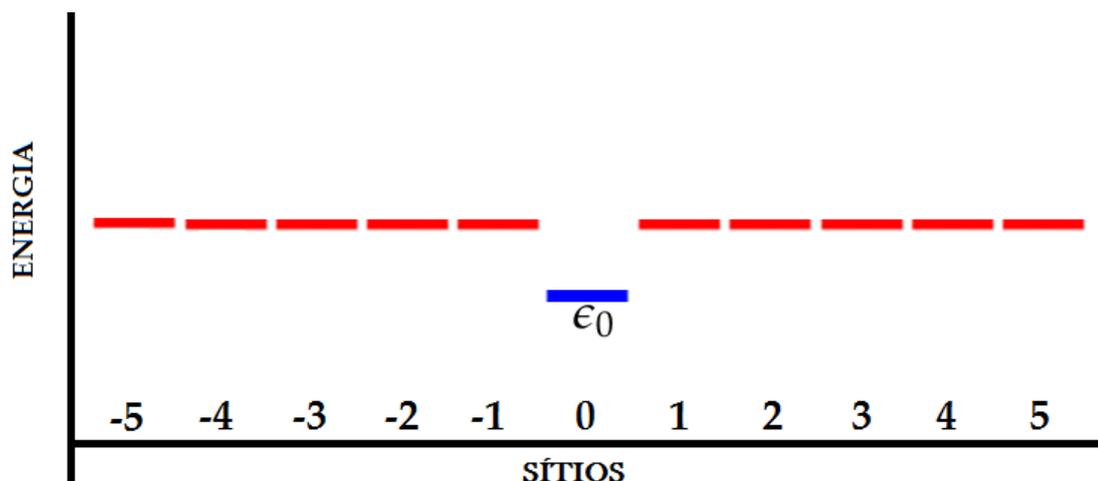


FIGURA 2 – Configuração de uma rede com uma impureza no centro, onde  $\epsilon_0$  representa o potencial de uma impureza no sítio, e os outros sítios da rede não possuem impurezas.

estaremos medindo a largura da gaussiana que é a condição inicial do sistema, dada pela equação (3.17), o centróide, a participação e o desvio quadrático médio, são grandezas que simulamos para esse sistema. A energia da impureza do sítio central em azul é dada por  $\epsilon_0$ .

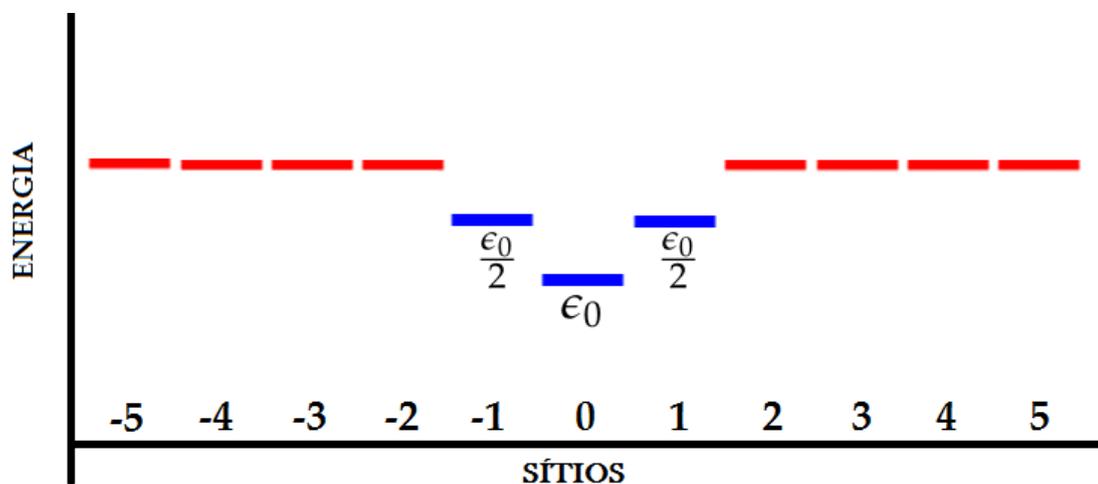


FIGURA 3 – Configuração de uma rede com três impurezas no centro, onde  $\epsilon = \epsilon_0$  representa o potencial da impureza no sítio central e  $\epsilon = \frac{\epsilon_0}{2}$  os sítios vizinhos.

A Figura 3 mostra como estão distribuídas as impurezas no sistema cristalino com três impurezas. A energia do sítio central é  $\epsilon_0$ , e os seus vizinhos laterais tem energia de impureza dada por  $\frac{\epsilon_0}{2}$ .

Neste trabalho estudamos casos com desordem não periódica mais determinística. Neste a energia das impurezas foram distribuídas da seguinte forma,

$\epsilon = 0$  e  $\epsilon = \epsilon_0$ . Usou-se as series de Fibonacci e Thue-Morse para preencher os sítios da rede.

A sequencia de Fibonacci foi usada inicialmente por Fibonacci para determinar os pares de coelhos ao final de cada mês.  $A$  representa um casal de coelhos jovens, que após uma geração (mês) se torna um casal de coelhos férteis representado por  $B$ . Por sua vez  $B$  na próxima geração produz um casal de coelhos jovens e permanecem férteis. De forma sintética, pode-se descrever isto da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} A &\rightarrow B \\ B &\rightarrow AB \end{aligned}$$

Se a cada geração for respeitada esta regra, será produzida a seguinte sequência aperiódica determinística:

$A$   
 $AB$   
 $ABA$   
 $ABAAB$   
 $ABAABABA$   
 $ABAABABAABAAB\dots$

Pode-se construir uma rede que possua esta sequência, tal que as energias de cada sítio são tais que  $A \rightarrow E_A$  (Energia no sítio  $A$ ), e  $B \rightarrow E_B$  (Energia no sítio  $B$ ). Com isto pode-se investigar um sistema onde as energias em cada sítio segue a sequência de Fibonacci[14,15].

A Figura 4 mostra um exemplo de aplicação de formação de uma super rede com a sequência Fibonacci, a mesma pode ser vista a cima na forma de  $A$ s e de  $B$ s. Pode-se verificar que a primeira geração tem 1 casal, a segunda 1 casal, e as gerações seguintes possuem a soma das duas gerações anteriores, ou seja: 1,2,3,5,8,13,21,34,55..., a famosa sequência de Fibonacci.

Nos trabalhos de [14,15] além da sequência de Fibonacci também foi investigada a sequência Thue-Morse. Eles usaram a regra da substituição para gerar as impurezas na rede, por essa regra tem-se  $j_0 \rightarrow AB$ , onde  $j_0$  é a condição inicial da sequência, após isso tem-se  $A \rightarrow AB$  e  $B \rightarrow BA$ . Dese modo as energias de cada

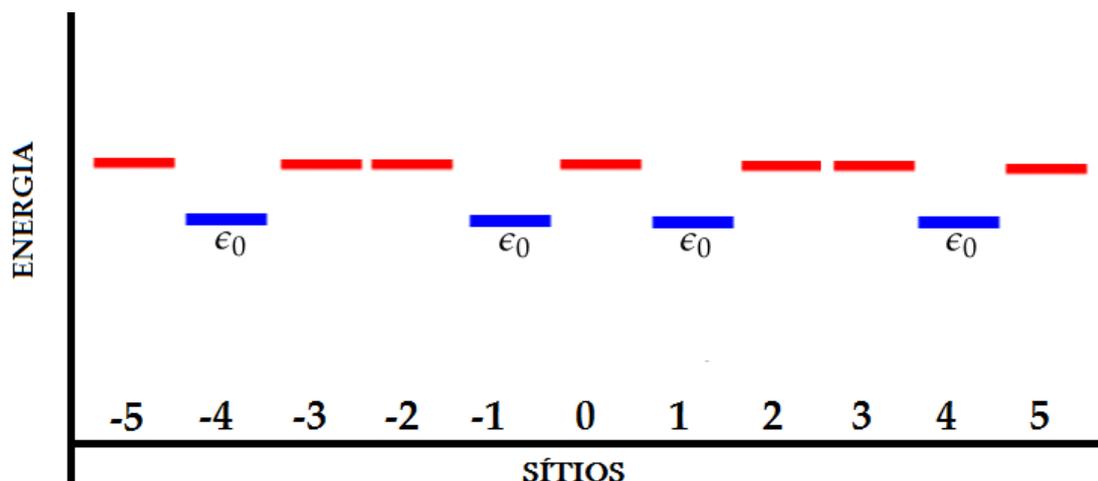


FIGURA 4 – Recorte de uma rede preenchida com a sequencia Fibonacci, onde  $A = 0$  e  $B = \epsilon_0$ .

sítio são tais que  $A \rightarrow E_A$  (Energia no sítio  $A$ ), e  $B \rightarrow E_B$  (Energia no sítio  $B$ ).

$A$   
 $AB$   
 $ABBA$   
 $ABBABAAB$   
 $ABBABAABBAABABBA$   
 $ABBABAABBAABABBABAABABBAABBABAAB$   
 ...

Com a sequência de Thue-Morse tem-se um outro tipo de estrutura não-periódica, mas determinística.

A figura 5 apresenta de forma gráfica a sequência Thue-Morse, onde foram preenchidos os sítios da rede com impurezas seguindo essa sequencia.

Neste trabalho as ordens das grandezas seguem os seguintes parâmetros. A energia para o termo de hopping  $V$ , foi fixada com o valor de  $-50meV$  (cinquenta milieletrovts). O parâmetro de rede  $a$  é da ordem de  $100\text{\AA}$ . A energia da desordem  $\epsilon$ , com unidade na ordem de  $eV$  (eletrovts) e o campo elétrico dc é da ordem de  $E = \eta \frac{kV}{cm}$ , para  $\eta = 1.0$  temos um campo elétrico de  $50 \frac{kV}{cm}$ .

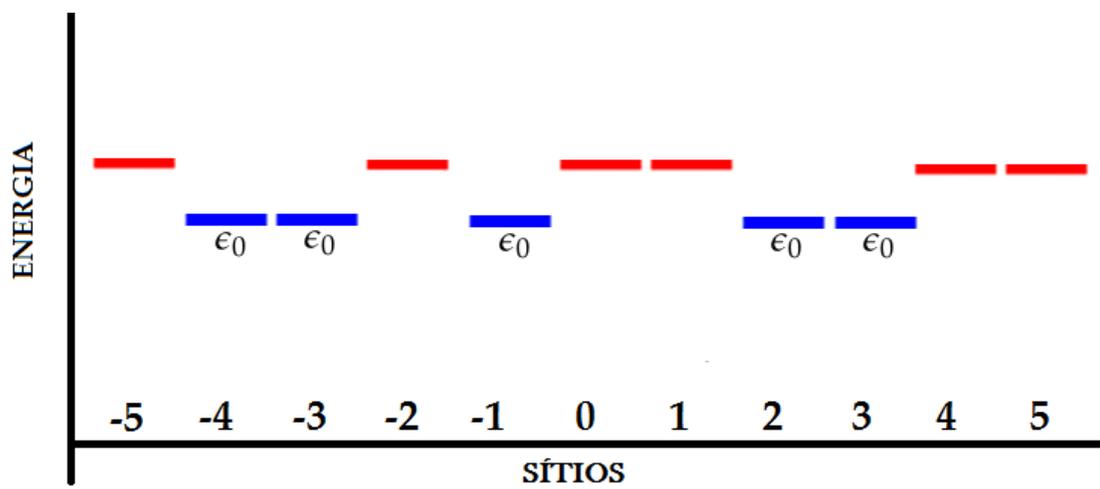


FIGURA 5 – Recorte de uma rede preenchida com a sequência Thue-Morse, onde  $A = 0$  e  $B = \epsilon_0$ .

## 4 RESULTADOS

---

Nesta parte do trabalho vamos expor os resultados simulados para cada caso conforme a condição inicial variada. Primeiro analisamos o sistema cristalino, em seguida mostramos dois casos para o sistema com desordem, no próximo estudamos a desordem e a velocidade, dando seqüência na análise variamos a largura da gaussiana, introduzimos campo elétrico e impureza na rede finalizamos mostrando os casos com ressonância encontrados nas simulações.

### 4.1 RESULTADOS NO SISTEMA CRISTALINO

Entendemos como sistema cristalino neste trabalho a simulação que foi realizada com o parâmetro energia de impureza  $\epsilon = 0.0$ , ou seja, um sistema sem impurezas.

Com a condição citada acima foi observado que não há localização do pacote de ondas. A figura 6 mostra a evolução temporal da função probabilidade, com isso vimos que logo nas primeiras unidades de tempo é possível encontrar o elétron em qualquer sitio da rede simulada.

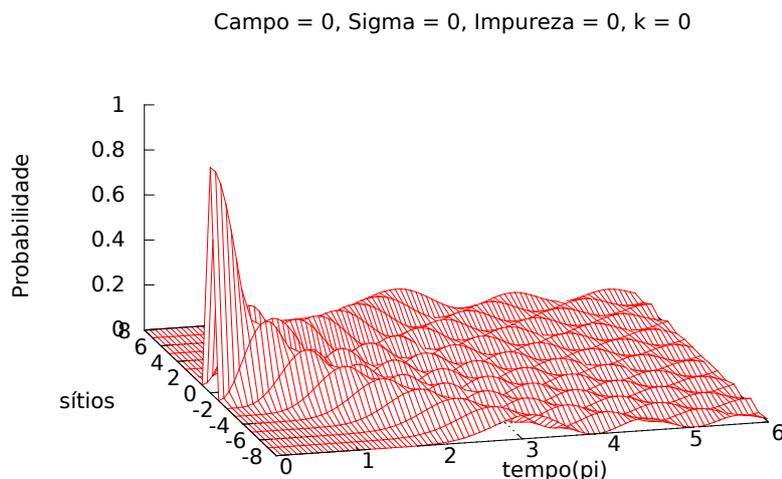


FIGURA 6 – Evolução temporal da função probabilidade equação (3.20).

## 4.2 RESULTADOS NO SISTEMA COM DESORDEM

Nesta parte da análise dos resultados deu-se ênfase ao casos simulados com com as impurezas distribuídas pelas sequências Fibonacci e Thue-Morse, com a finalidade de comparar os resultados simulados com os já existentes na literatura que motivou este trabalho. Os resultados simulados estão de acordo com os resultados dos seguintes trabalhos [1–4].

A figura 7, e a figura 8 apresenta o *msd* para os casos Fibonacci e Thue-Morse, tanto o caso Fibonacci quanto o caso Thue-Morse apresentam os resultados previstos por Silva [14] e outros, onde ele mostra que o  $MSD \propto t^2$  para o caso Fibonacci, e  $MSD \propto t^{1.65}$  para o caso Thue-Morse, sendo que ambos os comportamentos foram observados para tempos longos.

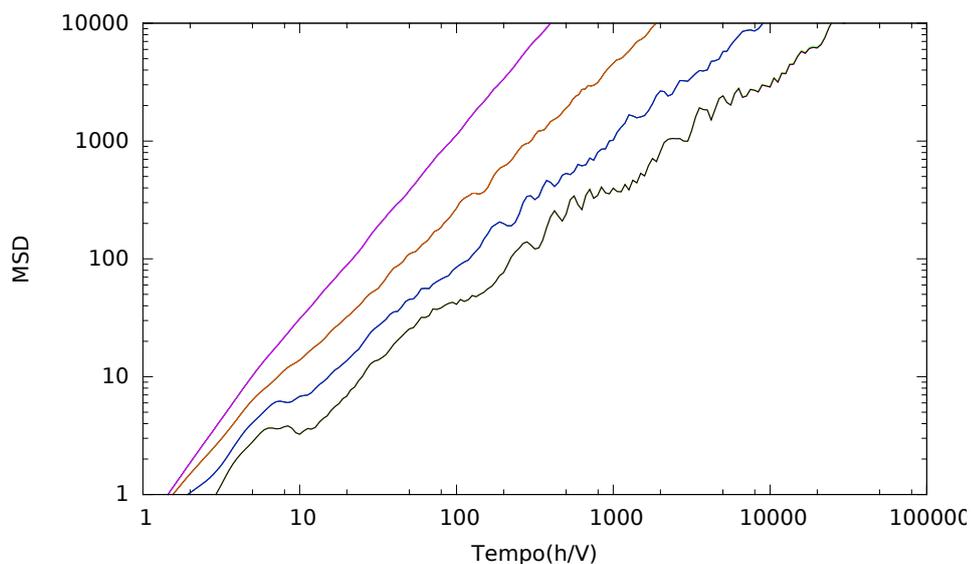


FIGURA 7 – Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$  para  $E = 0.0, \epsilon = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, k = 0.0$  e  $\sigma = 0.0$ , para a distribuição Fibonacci.

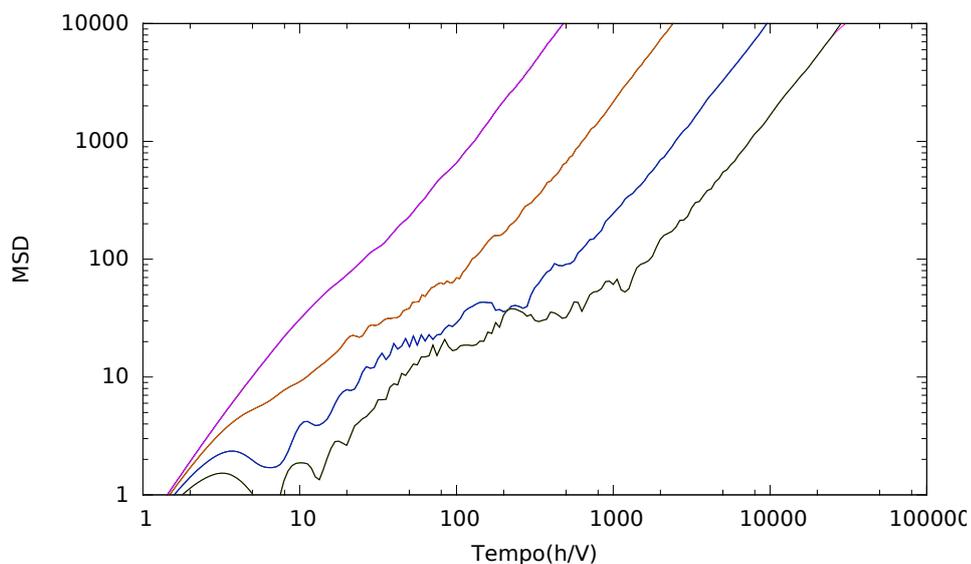


FIGURA 8 – Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$  para  $E = 0.0, \epsilon = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, k = 0.0$  e  $\sigma = 0.0$ , para a distribuição Thue-Morse.

### 4.3 RESULTADOS NO SISTEMA COM DESORDEM E VELOCIDADE

Nesta parte dos resultados estudamos os casos com desordem e velocidade inicial, a velocidade inicial do pacote está associada ao momentum do sistema e

a desordem a impureza.

A figura 9 e a figura 10 mostram como é o comportamento das funções: centroide, participação, *msd* e energia quando o sistema apresenta variação da velocidade inicial, a velocidade está variando em um intervalo de  $[0...π]$  de 0.1 em 0.1. A equação (3.19) nos dá o comportamento do centro do pacote em função dos dados da simulação, a equação (3.20) nos dá o *MSD*, A participação, que informa quantos sítios participaram da simulação foi definida na equação (3.21) e a energia na (3.22)

Vamos usar as seguintes funções:

$$P = a_p t + b_p, \quad (4.1)$$

$$C = a_c t + b_c, \quad (4.2)$$

$$M = a_m t^2 + b_m, \quad (4.3)$$

A equação (4.1) mostra o comportamento linear da função participação, a equação (4.2), também linear mostra o comportamento do centróide e a equação (4.3), que é uma função quadrática, mostra o comportamento do desvio quadrático médio. Estudamos o comportamento das constantes dessas funções em relação a uma velocidade atribuída ao sistema pelo momentum. A energia do sistema, que é uma constante, vai ser representada por  $b_E$ . As constantes que comparamos com o momentum são:  $a_p$  para coeficiente angular da participação,  $a_c$  para coeficiente angular do centróide e  $a_m$  para coeficiente que acompanha  $t^2$ .

A figura 11 apresenta o comportamento das constantes das funções participação, centróide, desvio quadrático médio *msd* e energia em relação ao momentum do sistema. Nela pode-se observar que as constantes, em relação ao momentum apresentam comportamento cossenoidal e que a energia mostra claramente a sua forma para a primeira zona de Brillouin.

Nesta parte do trabalho analisamos os casos com desordem e velocidade. A velocidade foi atribuída ao pacote por meio de um momentum inicial. A desordem ou impureza foi distribuída na rede de quatro formas diferentes: na forma de uma impureza no centro, na forma de três impurezas no centro, sendo as vizinhas metade da impureza central e as outras formas foram dadas pelas series de Fibonacci e Thue-Morse.

Nos casos Fibonacci e Thue-Morse, mesmo quando aumentamos a energia da impureza e a velocidade inicial não foi observada uma localização efetiva do

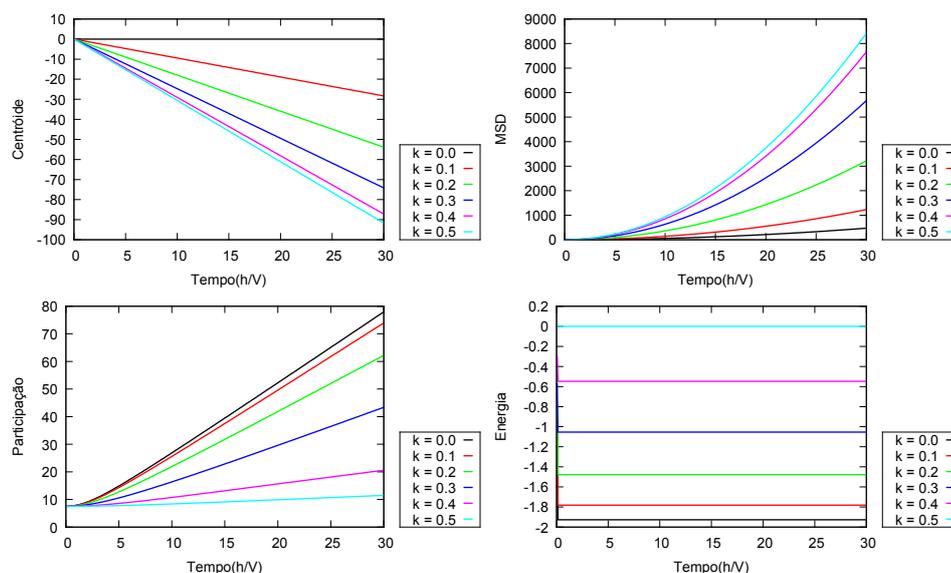


FIGURA 9 – Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação, do centróide e da energia para validar a simulação de uma impureza.  $k$  variando de 0.0 a 0.5.

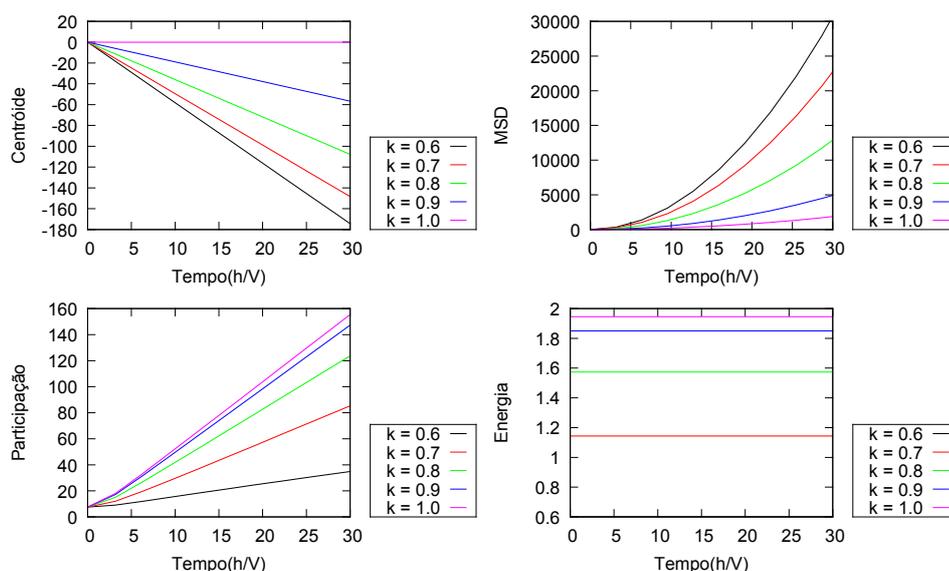


FIGURA 10 – Evolução temporal do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação, do centróide e da energia para validar a simulação de uma impureza.  $k$  variando de 0.6 a 1.0.

pacote de ondas. Utilizamos filmes da dinâmica do pacote ao longo do tempo para observar esse comportamento.

Os casos com uma e com três impurezas apresentaram localização parcial significativa do pacote de ondas. A figura 12 mostra a probabilidade em função do tempo para o caso com uma impureza no centro. Nela pode-se ver que

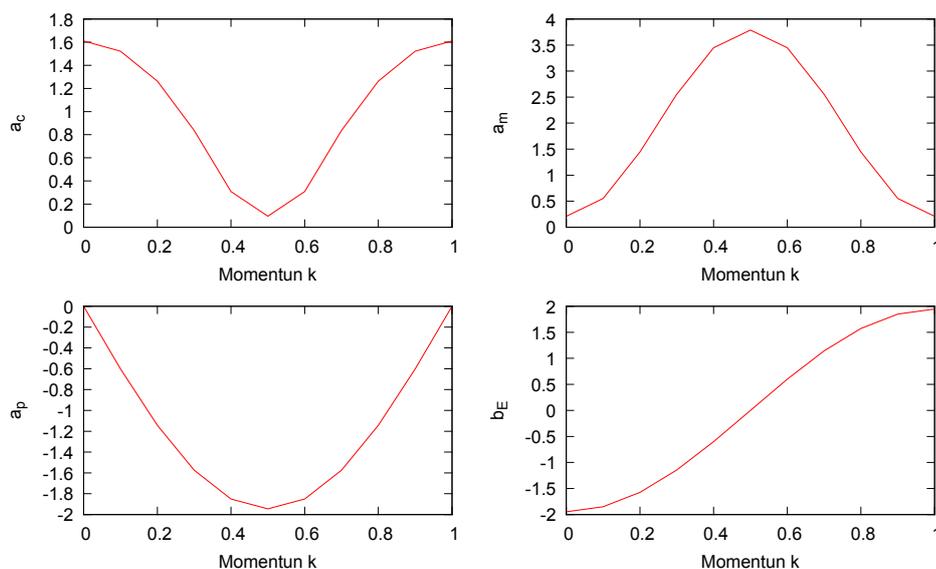


FIGURA 11 – Representação gráfica do comportamento do coeficiente angular das funções participação e centróide, da constante linear para a energia e do coeficiente que acompanha o termo quadrático da função de grau dois, para o *msd*, todos em relação ao momentum  $k$ .

sem velocidade e sem desordem o sistema tende a não localizar. Todos os casos apresentam esse comportamento nessa situação. No entanto quando acrescentamos impurezas e velocidade os casos com uma e com três impurezas localizam quando aumentamos a energia da impureza e a velocidade do sistema, o que pode ser observado na A figura 13.

A figura 14 mostra que se continuarmos aumentando a velocidade e a energia da impureza o sistema tende a aumentar a parcela localizada do pacote. Com isso mostramos que dependendo da forma que a impureza é depositada no sistema a velocidade influencia na localização dinâmica do pacote eletrônico. Neste trabalho os sistemas com duas e com três impurezas apresentam essa característica enquanto as distribuição Fibonacci e Thue-Morse não.

$$\eta = 0.0, \sigma = 3.0, \varepsilon_0 = 0.0, k = 0.0$$

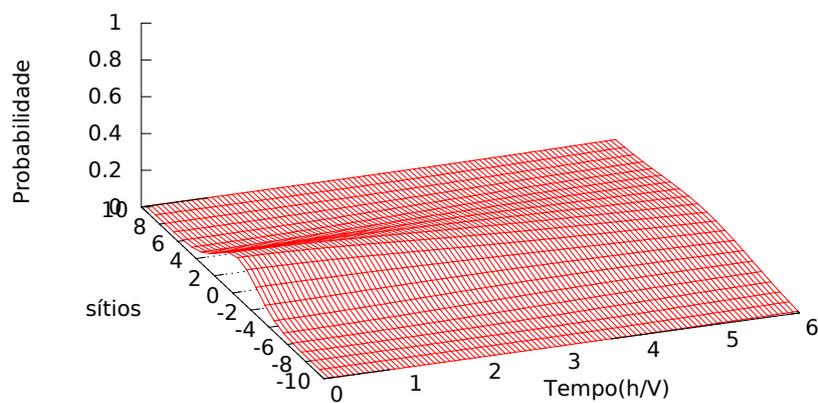


FIGURA 12 – Evolução temporal da probabilidade para o caso com uma impureza. Sistema com velocidade dada por um momentum  $k = 0.0$

$$\eta = 0.0, \sigma = 3.0, \varepsilon_0 = 0.5, k = 1.0$$

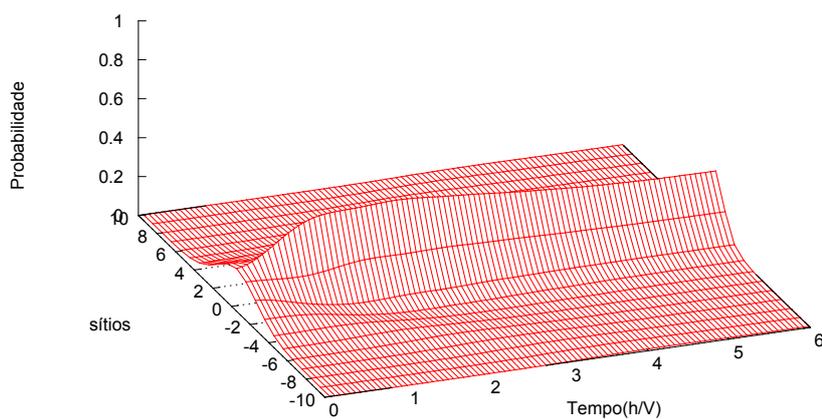


FIGURA 13 – Evolução temporal da probabilidade para o caso com uma impureza. Sistema com velocidade dada por um momentum  $k = 1.0$

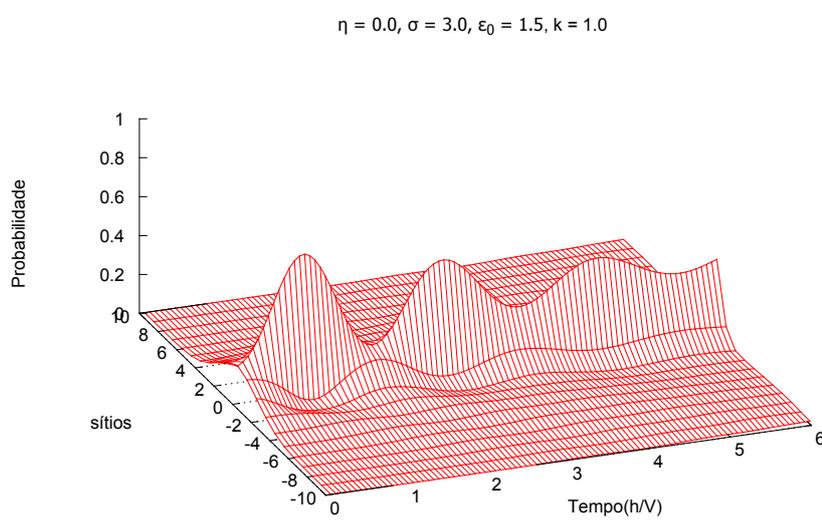


FIGURA 14 – Evolução temporal da probabilidade para o caso com uma impureza. Sistema com velocidade dada por um momentum  $k = 1.0$

## 4.4 RESULTADOS NO SISTEMA COM VARIAÇÃO DE GAUSSIANA

Nesta seção analisa-se o comportamento dos sistemas variando a largura da gaussiana. Foram estudados trinta e um casos, variando a largura de 0.1 em cada simulação. As figuras 16, 17 e 18 apresentam os gráficos para o centróide, para a participação, para o desvio quadrático médios e para a energia. Essas figuras mostram que não há uma influencia significativa na dinâmica do pacote quando varia-se a largura da gaussiana. Há apenas uma diferença nas constantes, coeficientes das funções que representam o comportamento das grandezas mostradas nas As figuras 16, 17 e 18. A energia, o momentum e a largura da gaussiana apresentam o comportamento mostrado na figura 15.

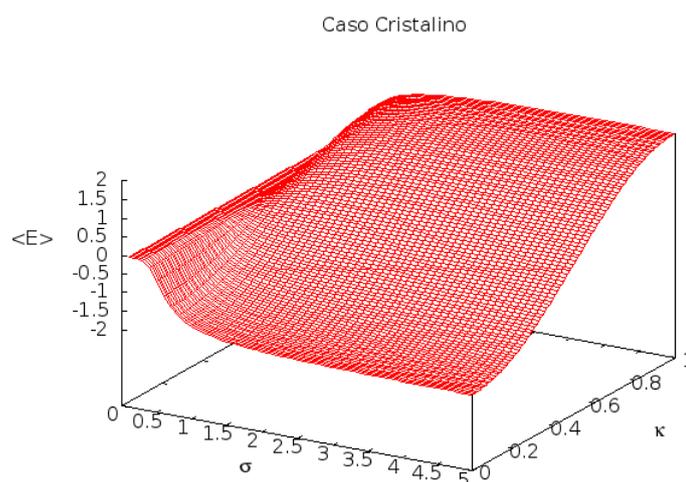


FIGURA 15 – Relação entre energia , largura da gaussiana e momentum.

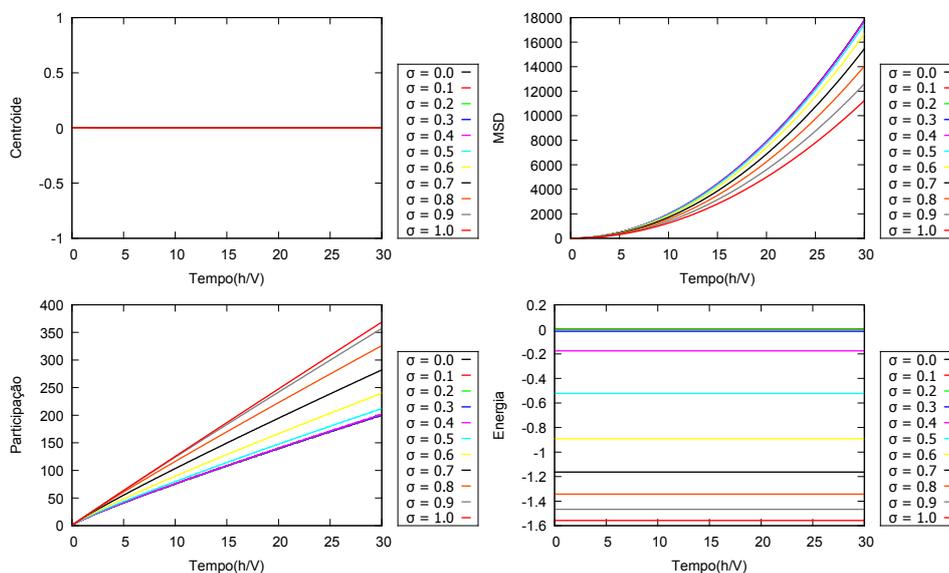


FIGURA 16 – Evolução temporal do centróide, do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação e da energia, com sigma  $\sigma$  variando de 0.0 a 1.0, com passos de 0.1 em 0.1 . O sistema apresenta  $\epsilon = k = E = 0$ .

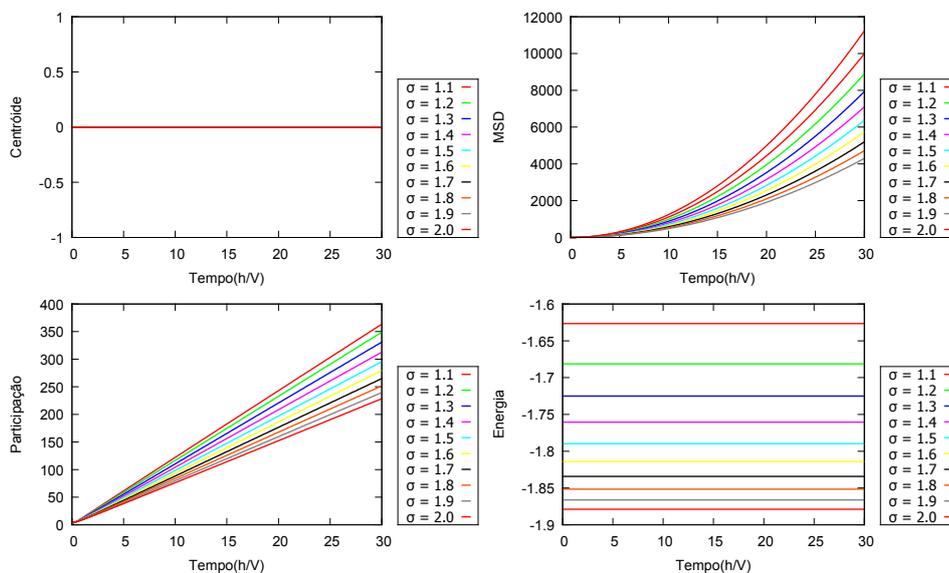


FIGURA 17 – Evolução temporal do centróide, do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação e da energia, com sigma  $\sigma$  variando de 1.1 a 2.0, com passos de 0.1 em 0.1 . O sistema apresenta  $\epsilon = k = E = 0$ .

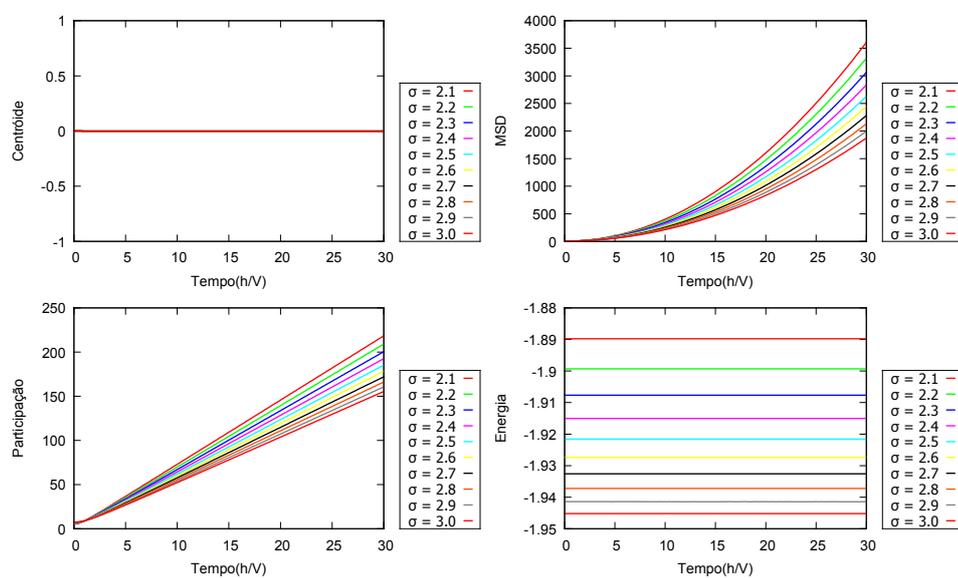


FIGURA 18 – Evolução temporal do centróide, do desvio quadrático médio  $msd$ , da participação e da energia, com sigma  $\sigma$  variando de 2.1 a 3.0, com passos de 0.1 em 0.1 . O sistema apresenta  $\epsilon = k = E = 0$ .

## 4.5 RESULTADOS NO SISTEMA COM DESORDEM E CAMPO ELÉTRICO DC

Ao introduzir um campo elétrico no sistema aqui considerado, podemos observar as oscilações de Bloch variando apenas a intensidade do campo no caso cristalino. As figura 19 e figura 20 mostram as oscilações de Bloch que simulamos também com a finalidade de validar nossos resultados.

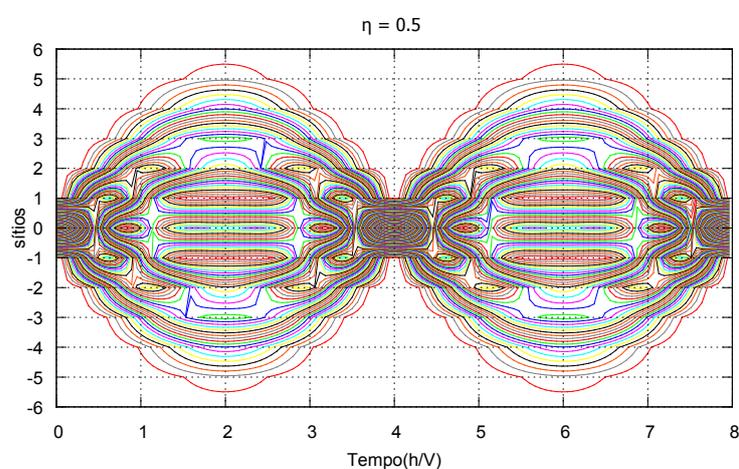


FIGURA 19 – Oscilações de Bloch na rede cristalina

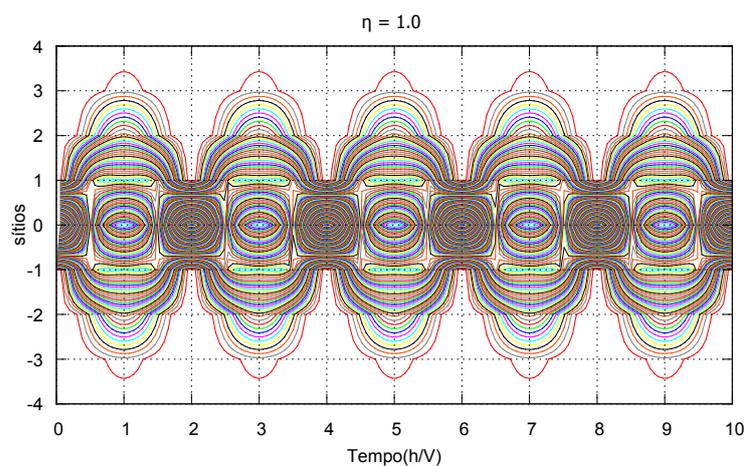


FIGURA 20 – Oscilações de Bloch na rede cristalina

Nesta seção analisa-se os casos com desordem e campo elétrico. Nestes foram

inserido no sistema uma largura de gaussiana, um campo elétrico uniforme e uma desordem nas formas: uma impureza no centro, três impurezas no centro e impurezas distribuídas pelas series de Fibonacci e Thue-Morse. O sistema foi estudado variando a largura da gaussiana e o campo elétrico, mantendo constante a energia da impureza.

As figuras 21, 22, 23 e 24 apresentam os resultados para os casos com desordem e campo elétrico. Nelas podemos ver, por meio das medidas do centróide, do desvio quadrático médio, da participação e da energia, que o campo é fator determinante para a localização da partícula. A impureza e a largura da gaussiana não dão uma contribuição considerável na localização da partícula no sistema.

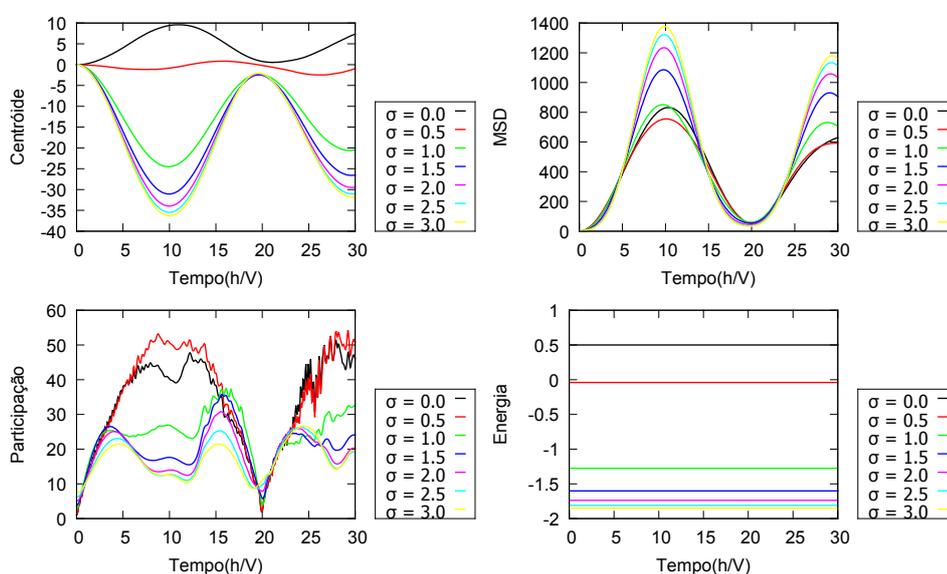


FIGURA 21 – Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  $E = 0.1$ .

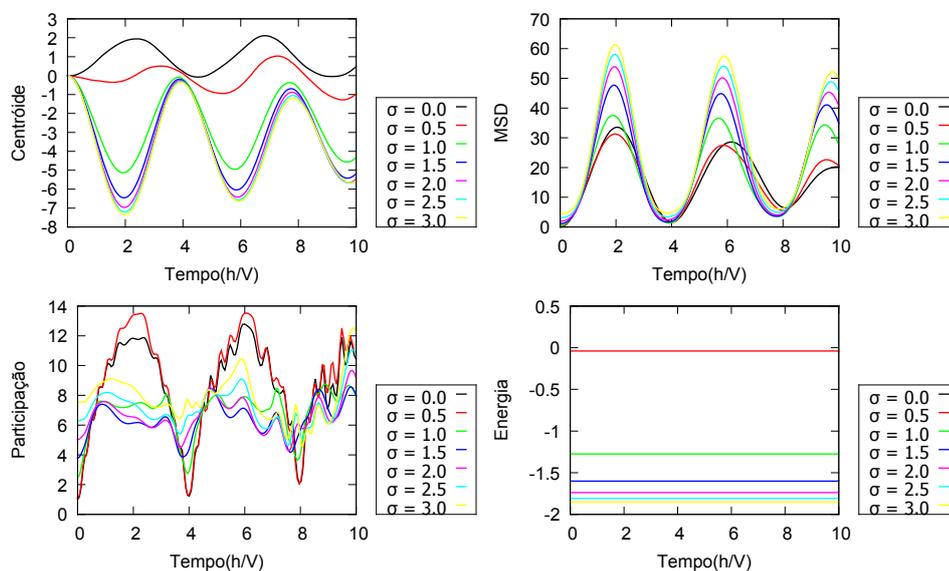


FIGURA 22 – Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  $E = 0.5$ .

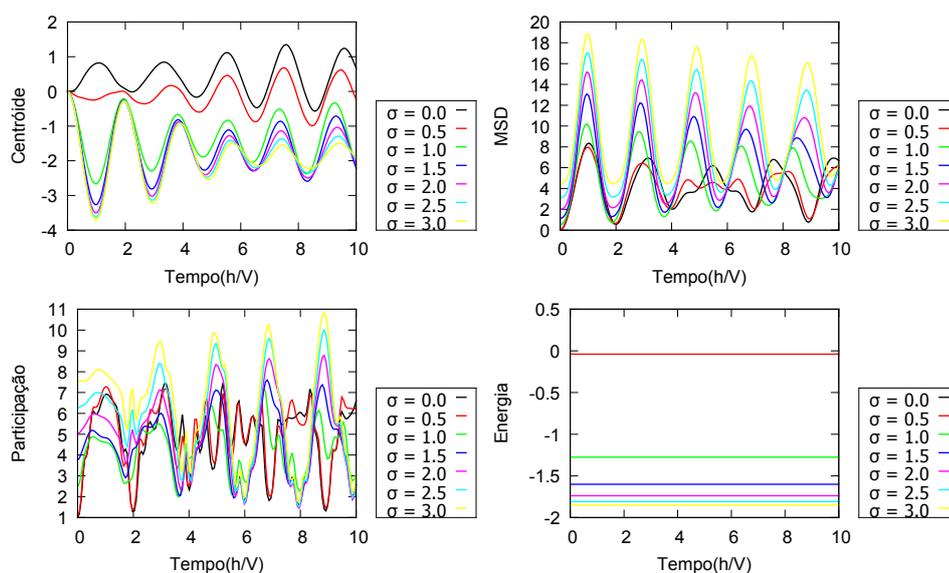


FIGURA 23 – Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  $E = 1.0$ .

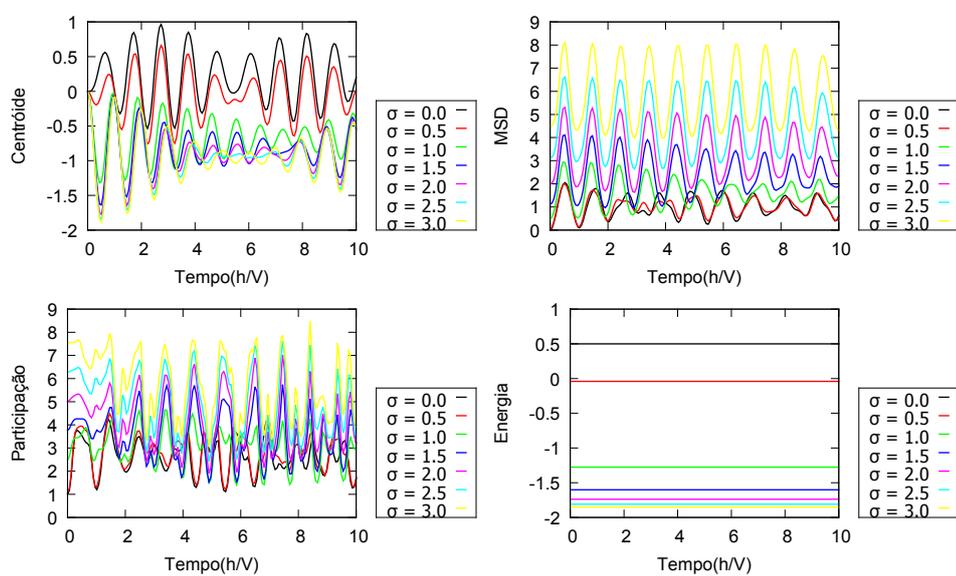


FIGURA 24 – Evolução temporal do sistema com desordem e campo elétrico  $E = 2.0$ .

## 4.6 RESULTADOS COM RESSONÂNCIA

Nos casos com desordem e campo elétrico, mantendo-se a largura da gaussiana igual a zero, para a simulação com três impurezas foi observado que alguns sítios da rede entravam em ressonância. Em seguida, variamos a largura da gaussiana para os casos com ressonância que encontramos e observamos que ao variar a largura da gaussiana, o pacote perde a ressonância e tende a espalhar-se na rede. A figura 25 mostra em quais sítios ocorre ressonância e a figura 26 mostra a probabilidade de encontrar os sítios em ressonância.

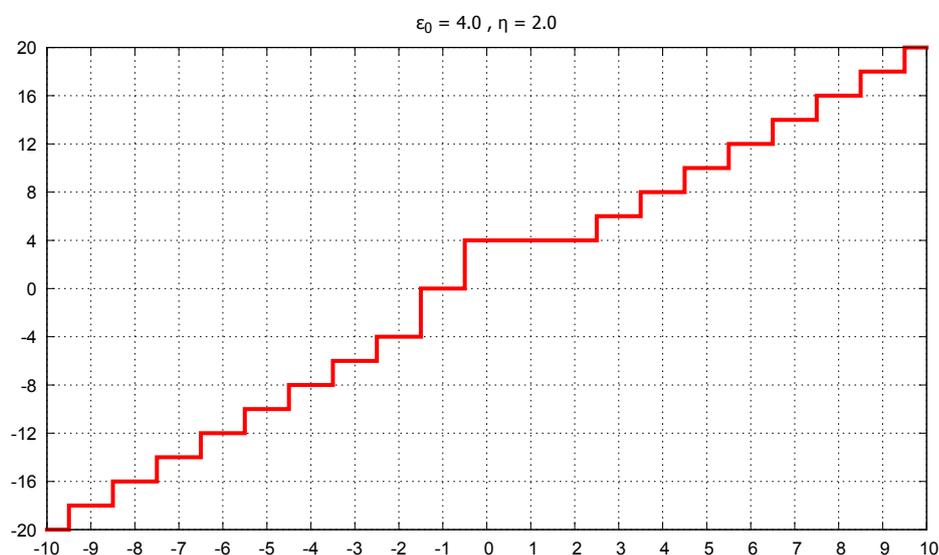


FIGURA 25 – Representação de sítios em ressonância tripla.

As Figuras 25 and 26 tem-se o campo elétrico de intensidade 2.0 e a energia da impureza de intensidade 4.0. Nesse caso encontra-se três sítios em ressonância que são, os sítio 0, 1 e 2, todos eles são visitados pelo pacote de ondas ao longo do tempo.

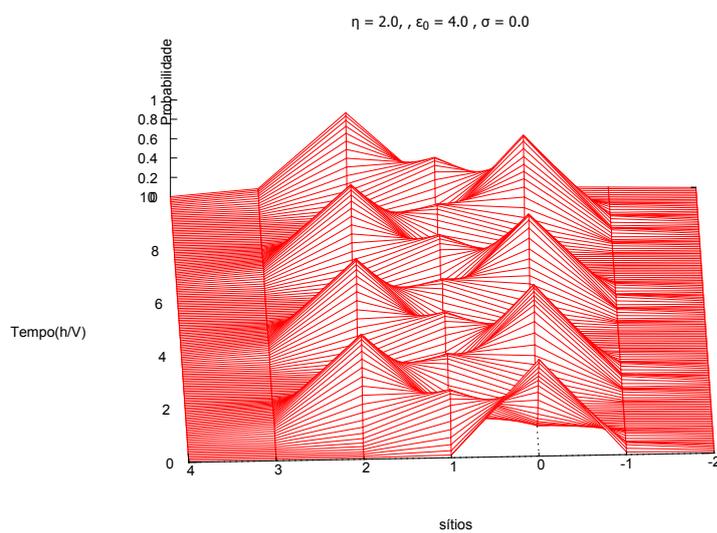


FIGURA 26 – Representação de sítios em ressonância tripla.

## 5 CONCLUSÃO

---

O objetivo deste trabalho foi estudar por meio de simulações computacionais o comportamento de redes cristalinas em sistemas lineares unidimensionais, neste sistema procurou-se estabelecer uma relação da variação da largura da gaussiana, da variação do momento e da variação dos campos elétricos estáticos entre a localização dinâmica e a desordem dos sistemas com quatro tipos de impurezas. Os casos estudados foram: caso com uma impureza no centro da rede, caso com três impurezas no centro da rede, casos com impurezas distribuídas na rede de forma aleatória mas determinística, que são: o caso Fibonacci e Thue-Morse.

A importância deste trabalho está na utilização de modelos computacionais para simular sistemas com impurezas em redes cristalinas, dando continuidade a trabalhos anteriores realizados por Silva [14] e outros. Silva investigou estes sistemas para o caso cristalino puro, com largura de gaussiana  $\sigma = 0.0$ , o que diferencia esse trabalho dos outros é que acrescentou-se a variação do momento e da largura da gaussiana.

Nas simulações para o caso cristalino sem campo elétrico foi observado que com uma impureza houve uma localização parcial do pacote de ondas, o mesmo ocorreu com os caso Fibonacci e Thue-Morse, no entanto para o caso com três impurezas prevaleceu a desordem no sistema. Com isso mostra-se que a variação do momento não dá uma contribuição significativa para o problema da localização dinâmica ou da desordem.

Nas simulações para o caso cristalino com campo elétrico estático variamos o campo e a largura da gaussiana e também o momento. Com isso pode-se observar que a variação da largura da gaussiana em campos de baixas e altas intensidades não produz desordem no sistema, mantendo o pacote de ondas localizado para todos os casos simulados neste trabalho.

Nas configurações de ressonância encontradas nas simulações para rede cristalina com três impurezas. Verificou-se que a variação da largura da gaussiana interfere na ressonância, fazendo com que o pacote de ondas se desloca no sentido contrário do campo e degenera os sítios centrais da rede simulada.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- 1 NAZARENO, H. N.; SILVA, C. A. A. da; BRITO, P. E. de. Dynamical localization in a one-dimensional crystal with an impurity under the action of an electric field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 50, p. 4503–4508, Aug 1994. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.4503>>.
- 2 NAZARENO, H. N.; BRITO, P. E. de; SILVA, C. A. A. da. Propagation of carriers in a one-dimensional quasicrystal. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 51, p. 864–871, Jan 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.864>>.
- 3 BRITO, P. E. de; SILVA, C. A. A. da; NAZARENO, H. N. Field-induced localization in fibonacci and thue-morse lattices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 51, p. 6096–6099, Mar 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.6096>>.
- 4 SILVA, C. A. A. da; BRITO, P. E. de; NAZARENO, H. N. Propagation of carriers in a random-dimer model: The interplay between disorder and electric field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 52, p. 7775–7778, Sep 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.7775>>.
- 5 MELLO, D. F. *O método semi-empírico TIGNT-BINDING aplicado ao cálculo da estrutura de bandas, densidade de estados, vacância ideal e função dielétrica em semicondutores*. Dissertação (Mestrado) — Universidade estadual de campinas, Instituto de Física, Curso de Pós-Graduação em Física, Campinas, 1988.
- 6 CALLISTER, W.; SOARES, S. *Ciência e engenharia de materiais: uma introdução*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2008.
- 7 FERREIRA, A. G. *Estatística Não-Extensiva Aplicado ao Cálculo do Calor Específico Eletrônico em Estrutura Quaseperiódica*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Rio Grande do Norte, 2008.
- 8 BASAALO, J. A crônica da física do estado sólido: Iii. teoria de bandas.
- 9 BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, Springer-Verlag, v. 52, n. 7-8, p. 555–600, 1929. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01339455>>.
- 10 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 109, p. 1492–1505, Mar 1958. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1492>>.

- 11 KITTEL, C.; MCEUEN, P. *Introduction to solid state physics*. [S.l.]: Wiley New York, 1976.
- 12 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Física do Estado Sólido*. [S.l.]: Obra publicada pela Universidade Estadual de Campinas, 1931.
- 13 LEITE, R.; CASTRO, A. *Física do Estado Sólido*. [S.l.]: Obra publicada pela Universidade Estadual de Campinas, 1931.
- 14 SILVA, C. A. A. *Relação entre a desordem e a ação de Campos eletricos na propagação de portadores em sistemas unidimensionais lineares e nao-lineares*. Dissertação (Mestrado) — Universidade de Brasí , Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Brasí, 1998.
- 15 BRITO, P. E. de; RODRIGUES, E. S.; NAZARENO, H. N. Dynamics of two interacting electrons in a one-dimensional crystal with impurities. 2004.