

Gerson Ferreira Rocha

**Impacto da Interação Elétron-Fônon na
Dinâmica Eletrônica em Redes Cristalinas
Unidimensionais**

Brasília

30 de junho de 2017

Gerson Ferreira Rocha

Impacto da Interação Elétron-Fônon na Dinâmica Eletrônica em Redes Cristalinas Unidimensionais

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciência de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais da Faculdade UnB Planaltina da Universidade de Brasília.

Universidade de Brasília

Faculdade UnB Planaltina

Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais

Orientador: Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito

Brasília

30 de junho de 2017

Ficha catalográfica elaborada automaticamente,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

RG382i Rocha, Gerson Ferreira
Impacto da Interação Elétron-Fônon na Dinâmica
Eletrônica em Redes Cristalinas Unidimensionais /
Gerson Ferreira Rocha; orientador Paulo Eduardo De
Brito. -- Brasília, 2017.
59 p.

Dissertação (Mestrado - Mestrado em Ciência de
Materiais) -- Universidade de Brasília, 2017.

1. Oscilações de Bloch. 2. Localização Dinâmica. 3.
Interação Elétron-Fônon. 4. Pólaron. I. De Brito, Paulo
Eduardo, orient. II. Título.

Gerson Ferreira Rocha

Impacto da Interação Elétron-Fônon na Dinâmica Eletrônica em Redes Cristalinas Unidimensionais

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciência de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais da Faculdade UnB Planaltina da Universidade de Brasília.

Trabalho aprovado. Brasília, 26 de julho de 2017:

Presidente/Orientador

Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito
FUP/UnB

Titular

Prof. Dr. Hugo Nicolas Nazareno
IF/UnB

Titular

Prof. Dr. Luiz Antônio Ribeiro Júnior
IF/UnB

Suplente

Prof. Dr. Bernhard Georg Enders Neto
FUP/UnB

Brasília

30 de junho de 2017

A todos que abnegadamente têm se dedicado ao progresso das ciências.

Agradecimentos

Muitas pessoas contribuíram direta e indiretamente para a realização deste trabalho e todos merecem meus mais sinceros agradecimentos.

Primeiramente gostaria de agradecer aos meus pais, Juvêncio e Heroína, que sempre me apoiaram e me deram puxões de orelha quando necessário e, ainda em minha primeira infância me ensinaram os primeiros conceitos de aritmética e geometria;

Aos meus irmãos, Cleiton, Kelson, Cleidir e Werlon, que à sua maneira, cada um me ensinou muito sobre diversos aspectos da vida.

À minha namorada Laudenira Vieira com quem compartilhei risos e lágrimas nos últimos anos.

Aos professores da FUP Alex F. C. Campos, Armando de M. Maroja, Bernard G. E. Neto, Ismael V. de L. Costa, Marco A. A. Barbosa, Paulo E. de Brito e Renata A. da S. Souza, guias sagazes para mim e tantos outros que não conseguem exergar com clareza o tortuoso caminhas das ciências a ser percorrido.

Aos meus colegas curso Clovis, Edivaldo, Emilson, Fábria ,Hudson, Ingrid, Lucas e Paulo cuja convivência tornou a experiência educacional bem mais rica e agradável.

Aos servidores da secretaria de pós-graduação da FUP Jorivê e Aristides, sempre à postos satisfazer nossas intermináveis demandas.

Ao decanato de pesquisa e pós-graduação (DPP) da Universidade de Brasília e à coordenação de aperfeiçoamento de pessoal de nível superior (CAPES) por selecionar este projeto para ser contemplado por recursos oriundos do programa de financiamento CAPES/PROAP-2015.

Um agradecimento especial ao meu orientador Paulo Eduardo de Brito, pelas suas incontáveis contribuições. Por me apresentar apresentar seu estilo “root” de programação e os conceitos desconcertantes da mecânica quântica. E pelo seu exemplo cotidiano que inspira as pessoas a trilhar o caminho da força e virtude.

Peço desculpas as incontáveis outras pessoas que contribuíram desde meu nascimento para os acontecimentos presentes e que por lapso de memória não consigo lembrar os nomes.

Muito obrigado a todos!

Ser tolo e reconhecer que o é, vale mais que ser tolo e imaginar que é sábio.

autor desconhecido

Resumo

Neste trabalho foi analisado a dinâmica de um pacote de onda eletrônico em uma rede cristalina unidimensional sob a influência de campo elétrico externo DC/AC e, para tanto, foi utilizado o modelo Tight-Binding para representar o pacote de onda eletrônico. Foram investigadas as circunstâncias em que os campos elétricos induzem a partícula a executar movimento oscilatório, as oscilações de Bloch, mantendo-se dinamicamente localizada; Para dar cabo de tal tarefa foram utilizadas as grandezas desvio quadrático médio, participação eletrônica, centróide, e probabilidade de retorno. Além disso, foram investigados os efeitos da interação elétron-fônon sobre a dinâmica do pacote, com ênfase na formação e dinâmica de pólarons.

Palavras-chaves: Oscilações de Bloch, Localização dinâmica, Interação elétron-fônons, Pólaron.

Abstract

In this work was analyzed the dynamic of the electron wave packet in a one-dimensional crystalline network under the action of DC/AC electrical field, for this, we use the Tight-Binding model to represent the electronic wave packet. We investigated the circumstances in which the electric fields induce the particle to perform oscillatory motion, the Bloch oscillations, remaining dynamically localized; To accomplish such a task were used the mean square deviation, electronic participation, centroid, and probability of return. In addition, we investigated the effects of the electron-phonon interaction on the dynamics of the package, with emphasis on the polaron formation and its dynamics.

Keywords: Bloch Oscillation, Dynamic localilization, Electron-Phonon Interaction, Polaron.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	O Teorema de Bloch	12
1.2	O Método Tight-Binding	14
2	METODOLOGIA	17
2.1	Dinâmica eletrônica	17
2.2	Resultados oriundos da Dinâmica Semi-clássica	19
2.2.1	Na Ausência de Campo elétrico	19
2.2.2	Sob Ação de Campo DC	20
2.2.3	Sob a Ação de Campo Elétrico AC	20
2.2.4	Sob a Ação de Campos DC e AC Sobrepostos	21
2.3	Vibrações da Redes Cristalinas Unidimensionais	21
2.4	A Interação Elétron-Fônon	22
3	RESULTOS	27
3.1	Elétron em um potencial periódico	27
3.1.1	Livre da influência de campos elétricos externo	27
3.1.2	Sob influência de campo elétrico DC	29
3.1.3	Sob influência de campo elétrico AC	33
3.1.4	Sob influência de campos elétricos DC e AC Sobrepostos	35
3.2	Interação elétron-fônon	36
3.2.1	Livre de influência de campos externos	36
3.2.2	Sob influência de campo elétrico DC	39
3.2.3	Interação elétron-fônon sob influência de campo elétrico AC	44
	Conclusão	51
	REFERÊNCIAS	52
	APÊNDICES	54
	APÊNDICE A – ALGORITMO	55

1 Introdução

O estudo dos fenômenos relacionados ao transporte eletrônico possui grande importância, tanto para Física teórica quanto para a aplicada, tendo em vista que lança luz sobre uma gama de fenômenos que englobam o transporte de carga elétrica dentro dos materiais, o transporte de calor, e a determinação de suas características óticas [1]. Um dos primeiros modelos para a condução eletrônica em metais foi formulado por Drude em meados de 1900. Este modelo pressupõe que os metais contém uma população de elétrons que são acelerados por campo eletro-magnético externo, cujo movimento é amortecido por um tipo de força de atrito. Neste modelo a dinâmica eletrônica é regida pela equação

$$m \frac{d}{dt} \bar{v} = -e\bar{E} - e \frac{\bar{v}}{c} \times \bar{B} - m \frac{\bar{v}}{\tau}, \quad (1.1)$$

onde τ é o coeficiente que representa o atrito e é chamado tempo de relaxação. Na presença de um campo elétrico, a velocidade da partícula é dada por

$$\bar{v} = -\frac{\tau e}{m} \bar{E} + [\bar{v}_0 + \frac{\tau e}{m} \bar{E}] e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (1.2)$$

Para tempo muito maior que τ , obtemos

$$\bar{v} = -\frac{\tau e}{m} \bar{E} \quad (1.3)$$

e, sendo n a mobilidade eletrônica, a densidade de corrente \bar{j} surge em resposta ao campo \bar{E}

$$\bar{j} = -ne\bar{v} = \frac{ne^2\tau}{m} \bar{E}, \quad (1.4)$$

ond $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ é a condutividade elétrica, um coeficiente linear que relaciona o fluxo de corrente com o campo elétrico.

Em meados de 1894, Wilhelm Conrad Röntgen descobriu o raio x e sua incrível capacidade de revelar a estrutura interna dos objetos. Duas décadas depois foram criadas as técnicas de difração de raio x, e isto permitiu investigar a estrutura interna dos sólidos e descobriu-se que seus constituintes estão organizados em padrões tridimensionais bem definidas que se repetem no espaço, formando estruturas com geometrias específicas. A partir destas descobertas, vasta uma gama de empolgantes campos de estudos surgiram.

No efervescente contexto destas descobertas, Felix Bloch debruçou-se sobre o problema de um elétron no potencial periódico de um cristal iônico e, ao aplicar pioneiramente Mecânica Quântica na investigação das características dos sólidos, demonstrou que a função de onda do elétron em um potencial periódico consiste em uma onda modulada por uma função que tem a periodicidade do potencial. Este resultado ficou conhecido historicamente como teorema de Bloch e é ponto de partida para muitos estudos em física do estado sólido.

Ainda nesta seara, Bloch e Clarence Melvin Zener previram que a trajetória de um elétron em um cristal sem imperfeições, sob influência de um campo elétrico constante suficientemente intenso, deveria ser oscilatória, com frequência característica $w_B = \frac{eEa}{\hbar}$, e não uniforme como a do elétron livre. Este fenômeno é conhecido como oscilações de Bloch e, quando presente, diz-se que o elétron está dinamicamente localizado. A localização dinâmica da partícula em um sítio da rede se caracteriza pela probabilidade da partícula ser encontrada neste sítio manter-se não nula com o passar do tempo enquanto decai para zero ao se afastar deste sítio. As oscilações executadas pelo elétron geram ondas eletromagnéticas com frequência na ordem dos $10^{12}Hz$ e, por meio da detecção destas ondas as oscilações de Bloch foram observadas em superredes semicondutoras quase 100 anos após sua predição.

A investigação da dinâmica do elétron em um cristal é feita considerando os íons que o compõe imóveis. A análise da dinâmica considerando estas premissas permite compreendê-la com certa profundidade, porém, muitos aspectos do fenômeno são desprezados como o espalhamento do elétron pelas oscilações dos íons rede cristalina, o acoplamento das vibrações da rede ao pacote eletrônico e consequente formação do pólaron, etc., e isto impede uma compreensão mais completa do fenômeno do transporte eletrônico. Esta premissa, apesar de irreal, nos permite analisar diversos aspectos do comportamento eletrônico. Por outro lado, as limitações impostas pela imobilidade dos íons nos induz a ignorar uma gama de fenômenos relacionados. Alguns dos fenômenos ignorados na análise da dinâmica eletrônica são o espalhamento do elétron pelas oscilações dos íons que compõe a rede e o acoplamento das vibrações da rede a componentes com frequências específicas do pacote de onda que deste são ejetados. Este acoplamento dá origem a uma terceira entidade, o pólaron. A análise do comportamento térmico de materiais que não conduzem eletricidade também é prejudicado ao se supor a imobilidade dos íons que compõem a rede pois, sendo o elétron responsável pelo transporte térmico, nas condições impostas, os isolantes elétricos também seriam isolantes térmicos, o que não é verdade pois, nestes materiais o transporte de calor ocorre por meio intermédio das vibrações da rede [2], [3], [4].

O estudo das ondas viajantes em redes cristalinas, conhecidas por fônons, foi inicialmente realizado por Born [5] e consiste em catalogar seus modos de vibrações,

calcular suas frequências e determinar sua interação com forças mecânicas, eletromagnéticas, etc. Particularmente interessante é dinâmica simultânea de fônons e elétrons de condução em cristais iônicos, onde as forças coulombiana entre os íons da rede e o elétron resulta em uma forte interação elétron-fônon; o elétron distorce a rede atraindo íons positivos e repelindo ions negativos, o que resulta no surgimento de uma nuvem de fônons que envolve a partícula. Este é o processo da formação do pólaron, uma quasi-partícula inicialmente prevista por Lev Davidovich Landau em 1933 e que um importante papel em fenômenos como piezoeletricidade, supercondutividade e conversão de energia luminosa em elétrica em células solares. Nas palavras do próprio Landau:

...As vibrações dos íons da rede também afetam o estado dos elétron que nela transita. De fato, o movimento do íons e seguido adiabaticamente pelo elétron e, durante este movimento conjunto, o elétron polariza dieletricamente o cristal iônico com seu próprio campo elétrico [6].

Landau e Pekar determinaram a massa efetica e auto-energia do pólaron [6]. A interação de longo alcance do elétron com dipolos associados a modos ópticos longitudinais foi investigada por Fröhlich.

Uma breve e concisa exposição teórica sobre pólaron pode ser encontrada em [4].

1.1 O Teorema de Bloch

Nos primórdios da Física Quântica o físico suíço Felix Bloch demonstrou que as funções de onda de uma partícula sob influência de um potencial periódico são produtos de ondas planas $\exp(iK.r)$ por uma função $u(r)$ com a periodicidade do potencial,

$$\psi(r) = u_K(r)e^{iK.r}. \quad (1.5)$$

Onde r é o vetor posição e K o vetor de onda da função de onda.

Esta é a expressão matemática do teorema de Bloch. Para demonstrar sua veracidade para o potencial periódico unidimensional qualquer, como o gerado pelos átomos de uma rede cristalina, assumiremos condições de contorno periódicas, de modo que o último sítio da rede esteja conectado ao primeiro e, com isso evitamos

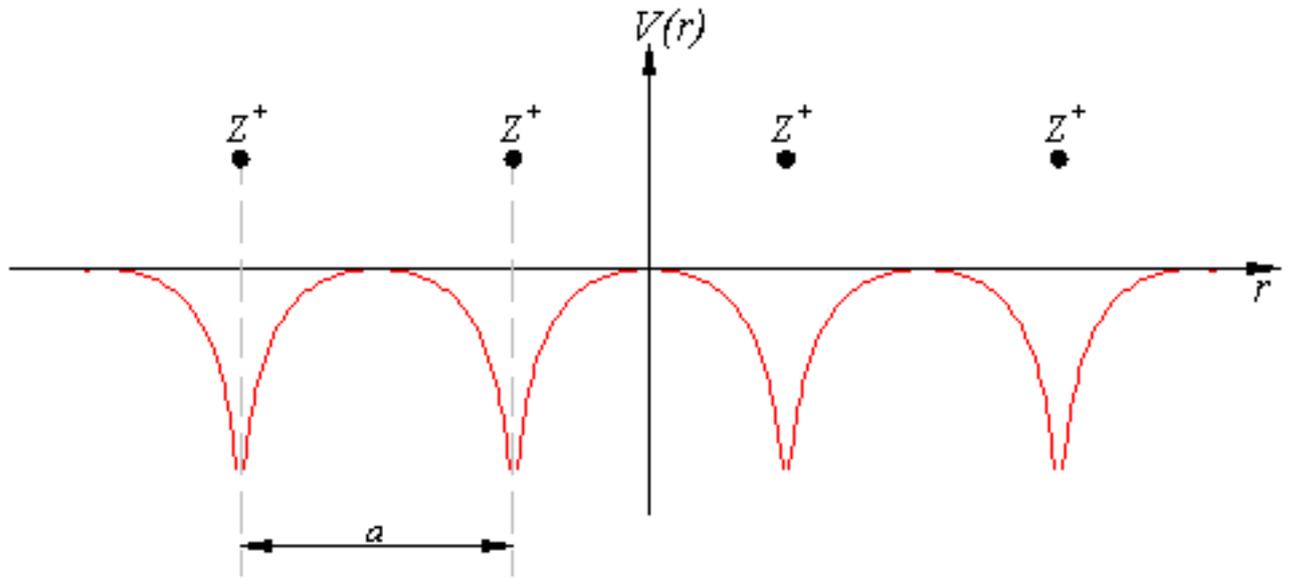


Figura 1 – potencial periódico típico de uma rede cristalina.

certas complicações que surgem ao lidar com a função de onda do elétron próximo à fronteira do material . Nessas condições a função de onda tem a forma:

$$\psi(x) = \psi(x + Na). \quad (1.6)$$

A equação da onda da partícula $\psi(x)$ e o potencial $U(x)$ são periódicos e, como toda função periódica fisicamente realizável, podem ser expandidas em séries de Fourier

$$\psi(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \psi_k e^{i\frac{2\pi xk}{Na}}; \psi_k = \frac{1}{a} \int_0^a \psi(x) e^{-i\frac{2\pi xk}{Na}} dx \quad (1.7)$$

e

$$U(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} U_n e^{i\frac{2\pi xn}{a}}; U_n = \frac{1}{a} \int_0^a U(x) e^{-i\frac{2\pi xn}{a}} dx. \quad (1.8)$$

Utilizando (1.7) e (1.8) para escrever a Equação de Shrödinger $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right] \psi = E\psi$, obtemos

$$\sum_k \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_n U_n e^{i\frac{2\pi xn}{a}} \right] \psi_k e^{i\frac{2\pi xk}{Na}} = \sum_k E \psi_k e^{i\frac{2\pi xk}{Na}}. \quad (1.9)$$

Esta equação equivale a

$$\sum_k \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{i2\pi k}{Na} \right)^2 - E \right) \psi_k e^{\frac{i2\pi x k}{Na}} + \sum_n \psi_k U_n e^{\frac{i2\pi x}{a} \left(n - \frac{k}{N} \right)} \right] = 0. \quad (1.10)$$

Fazendo a mudança da variável $\frac{k}{N} \rightarrow \frac{k-nN}{N}$ no somatório interno, podemos por a exponencial em evidência, obtendo:

$$\sum_k e^{\frac{i2\pi x k}{Na}} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{i2\pi k}{Na} \right)^2 - E \right) \psi_k + \sum_n U_n \psi_{k-Nn} \right] = 0. \quad (1.11)$$

A função de onda deve ser satisfeita para quaisquer valores de x . Para que isso ocorra, o termo entre colchetes na Equação (1.11) deve ser identicamente nulo, logo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{i2\pi k}{Na} \right)^2 - E \right) \psi_k = -\sum_n U_n \psi_{k-Nn}. \quad (1.12)$$

O conjunto de equações lineares (1.12) é conhecido com equação central e, pode-se demonstrar que os possíveis valores não nulos para ψ_{k-Nn} ocorrem apenas para $k < N$, com k natural [2]. Substituindo os valores de ψ_k na expansão de Fourier (1.7), obtemos:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{-\infty}^{\infty} \psi_{k+Nn} e^{i\frac{2\pi x(k+Nn)}{Na}} = \left(\sum_{-\infty}^{\infty} \psi_{k+Nn} e^{i\frac{2\pi x n}{a}} \right) e^{i\frac{2\pi x k}{Na}} \\ \psi(x) &= u(x) e^{\frac{i2\pi x k}{Na}}, \end{aligned} \quad (1.13)$$

onde $u(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \psi_{k+Nn} e^{i\frac{2\pi x n}{a}}$ possui a mesma periodicidade do potencial $U(x)$.

A forma estabelecida pelo teorema de Bloch para a função de onda $\psi(x)$ tem como consequência direta o fato de translações na rede não alterar a forma da função de onda, mas apenas introduzem uma fase, isto é,

$$\psi(x + na) = u(x + na) e^{\alpha(x+na)} = u(x) e^{\alpha na} e^{\alpha x} = e^{\alpha na} \psi(x), \quad (1.14)$$

com $\alpha = \frac{i2\pi k}{Na}$.

1.2 O Método Tight-Binding

O método tight-binding é um modelo conveniente para a descrição da estrutura eletrônica em moléculas e sólidos e, em muitos casos, como no modelo de Hubbard e o modelo de impurezas de Anderson, serve de ponto de partida para a construção de modelos mais sofisticados que consideram interações entre elétrons.

A função de onda de um elétron ocupando um átomo isolado, $\phi(x)$, satisfaz a equação de Shrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + U_{at}(x) \phi(x) = \varepsilon \phi(x). \quad (1.15)$$

Pela simplicidade da argumentação e da manipulação matemática, assumiremos que $\phi(x)$ ocupa apenas o orbital eletrônico s , que possui forma esférica e envolve simetricamente o núcleo atômico.

Tomemos N átomos isolados idênticos ordenados de modo periódico compondo um cristal unidimensional com distância interatômica a . O Hamiltoniano deste cristal será

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_n U_{at}(x - na). \quad (1.16)$$

Para encontrarmos autofunções da equação (1.16) que satisfaçam a condição de Bloch tomemos combinações lineares das N autofunções atômicas

$$\psi_K(x) = \sum_n e^{iKna} \phi(x - na). \quad (1.17)$$

A condição de Bloch é facilmente verificável para tais funções:

$$\begin{aligned} \psi_k(x + ma) &= \sum_n e^{iKna} \phi(x + ma - na) = e^{iKma} \sum_n e^{iK(n-m)a} \phi(x - (n-m)a) = \\ &= e^{iKma} \sum_p e^{iKpa} \phi(x - pa) = e^{iKma} \psi_K(x) \end{aligned} \quad (1.18)$$

Apesar de as funções de onda (1.17) satisfazerem a condição de Bloch, elas não são autofunções de (1.16); Entretanto, tais funções de onda podem ser combinadas para gerar uma solução para a equação de Shrödinger independente do tempo. Fazendo essas combinações, são geradas as seguintes autofunções:

$$\psi(x) = \sum_n b_n \psi_k(x) = \sum_n b_n e^{ikna} \phi(x - na). \quad (1.19)$$

Tais funções utilizadas para expressar $\psi(x)$ como combinação linear são conhecidas como funções e Wannier. Uma análise detalhada destas funções podem ser vistas em [3] ou [4].

Podemos determinar o modo em que a energia se relaciona com o vetor de onda K , a relação de dispersão, calculando o valor esperado da energia para um sítio qualquer. Para isso, basta multiplicar à esquerda da equação de Shrödinger o

conjugado da função de onda atômica localizada no sítio e integrar sobre o volume da célula unitária

$$\int \phi^*(x)H\psi(x)dx = \int \phi^*(x)E(K)\psi(x)dx. \quad (1.20)$$

Substituindo (1.19) em (1.20) e considerando que a função de onda atômica decai rapidamente ao se afastar do sítio onde esta localizada, temos $U(x+na)\phi(x) \approx 0$. Admitindo ainda ser ϕ normalizada, a expressão (1.20) pode ser escrita da forma

$$E(K) - \varepsilon = \sum_{n \neq 0} \int \phi^*(x)(H - U_{at}(x))e^{ikna}\phi(x-na)dx. \quad (1.21)$$

Dado o que o alcance de ϕ não ultrapassa seus vizinhos mais próximos, a equação (1.21) pode ser escrito da forma

$$E(K) - \varepsilon = e^{iKa} \int \phi^*(x)\phi(x-a)dx + e^{-iKa} \int \phi^*(x)\phi(x+a)dx. \quad (1.22)$$

Por ϕ ocupar apenas o orbital esférico, indistinguível em qualquer direção, $\phi(x+a) = \phi(x-a)$, e com isso, temos

$$E(K) - \varepsilon = (e^{iKa} + e^{-iKa}) \int \phi^*(x)\phi(x+a)dx$$

e

$$E(K) = \varepsilon + 2\beta \cos(Ka) \int \phi^*(x)\phi(x+a)dx. \quad (1.23)$$

Onde a β é uma constante para preservar a coerência dimensional da integral que acompanha o cosseno, conhecida como integral de hopping, representa a probabilidade do elétron estando em um sítio saltar para o sítio adjacente.

2 Metodologia

2.1 Dinâmica eletrônica

Partindo do exposto em [7] ou [8] e assumindo a ausência de impurezas na rede cristalina, deduz-se que o Hamiltoniano para sistema exposto anteriormente, sob influência de campos elétricos extenos é dado por

$$H = -w \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) + \varepsilon \sum_n |n\rangle \langle n| - e(E + F \text{sen}(\omega t))a \sum_n n |n\rangle \langle n|, \quad (2.1)$$

onde a constante w represeta um valor atribuido à integral de hopping. A dinâmica do elétron é dada pela equação de Shródinger dependente do tempo [9]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (2.2)$$

e, expressando o estado da partícula $\psi(t)$ como combinação linear de estados de Wannier

$$\psi(t) = \sum_n C_n(t) |n\rangle, \quad (2.3)$$

de modo que a probabilidade do estado eletrônico ao redor do n -ésimo sítio acontecer seja $p_n(t) = |C_n(t)|^2$, podemos aplicar (2.3) e (2.1) em (2.2)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n C_n(t) |n\rangle = \sum_m [w(|m\rangle \langle m+1| + |m+1\rangle \langle m|) + (\varepsilon - eSna) |m\rangle \langle m|] \sum_n C_n(t) |n\rangle, \quad (2.4)$$

onde $S = E + F \text{sen}(\omega t)$, e obter as equações diferenciais para o estado do sistema em termos dos coeficientes da expansão de Wannier

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_n = w(C_{n-1} + C_{n+1}) + (\varepsilon - e(E + F \text{sen}(\omega t))na)C_n. \quad (2.5)$$

Estas equações podem ser expressas adimensionalmente

$$i \frac{d}{d(\frac{w}{\hbar}t)} C_n = (C_{n-1} + C_{n+1}) + (\frac{\varepsilon}{w} - e(\frac{E}{w} + \frac{F}{w} \text{sen}(\omega t))na)C_n,$$

$$i \frac{d}{d\tau_e} C_n = (C_{n-1} + C_{n+1}) + (\kappa - (\eta_E + \eta_{Fsen}(\omega t))n) C_n. \quad (2.6)$$

A unidade de tempo é $[t] = \frac{\hbar}{w}$, a unidade de campo elétrico é $[E] = \frac{eEa}{w}$ e a unidade de energia $[Energia] = w$.

O sistema de equações (2.6) foi resolvido utilizando o método de Runge-Kutta de 4º ordem [10], [11] que, apesar de não fornecer solução exata, aproxima o resultado com precisão suficiente que nos permite entender o comportamento do elétron no potencial periódico. Para tanto, assumimos que o pacote de onda que representa a partícula esteja gaussianamente distribuída sobre a rede

$$C_n(0) = A e^{-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}}; \quad (2.7)$$

onde A é uma constante de normalização dada por $A = \sum_n |C_n|^2$.

O algoritmo que implementa a descrição matemática da dinâmica do elétron em um potencial periódico representado pela aproximação tight-binding é mostrado no apêndice 1. Após ter resolvido (2.6) para as amplitudes $C_n(t)$, um conjunto de medidas foram realizadas; algumas para caracterizar o comportamento dinâmico do elétron e outras para avaliar o processo de simulação.

- i) Como espera-se que $|\psi\rangle$ permaneça normalizada no decorrer do tempo, monitoramos a função

$$N = \sum_n |c_n|^2, \quad (2.8)$$

com intuito de detectar anomalias numéricas, cujo um primeiro indício de ocorrência seria obter valores para N diferentes de 1.

- ii) O desvio quadrático Médio,

$$\langle n^2 \rangle = \sum_n n^2 |c_n|^2, \quad (2.9)$$

importante medida para termos uma visão clara do problema de localização pois, a medida que a partícula espalha-se pela rede, os valores assumidos por $\langle n^2 \rangle$ crescem indefinidamente.

- iii) A probabilidade de retorno

$$R(t) = \sum_{n^*} |c_n|^2, \quad (2.10)$$

com n^* sendo os sítos que fazem parte do pacote inicialmente. Esta grandeza fornece, a cada instante, a probabilidade de pacote voltar à posição que ocupava no instante anterior.

iv) A função participação eletrônica

$$P_e(t) = \left\{ \sum_n |c_n|^4 \right\}^{-1}, \quad (2.11)$$

que indica a quantidade de sítos que participam do pacote de onda. Note que se o elétron estiver confinado a um único sítio, $p(t) = 1$. Por outro lado, estando o elétron uniformemente distribuído sobre os N sítos da rede teremos $p(t) = N$. Esta medida desempenha um importante papel por informar a quantidade de sítos necessários para que a função de onda desloque-se sem atingir as bordas da rede.

v) O centróide

$$\langle n \rangle = \sum_n n |c_n|, \quad (2.12)$$

que fornece a localização do centro do pacote, é uma importante medida pois, quando o pacote se mantém coeso, a dinâmica do centróide reflete a dinâmica do pacote de onda.

2.2 Resultados oriundos da Dinâmica Semi-clássica

Resultados obtidos analiticamente por meio da dinâmica semi-clássica considerando diversos casos de atuação de campos elétricos externos sobre o sistema.

2.2.1 Na Ausência de Campo elétrico

Quando a influência de campos elétricos externos não é sentida pelo sistema, demonstra-se que os coeficientes da equação (2.3) têm a forma

$$C_n(t) = i^n J_n \left(\frac{2|\beta|t}{\hbar} \right), \quad (2.13)$$

onde J_n é a função de Bessel de ordem n . Usando a propriedade das funções de Bessel $\sum_n J_n^2 z^2 = \frac{z^2}{2}$, o desvio quadrático médio assume a forma

$$\langle n^2 \rangle (t) = \sum_n 2 \left(\frac{\beta t}{\hbar} \right)^2. \quad (2.14)$$

Isto caracteriza o comportamento balístico do pacote de onda eletrônica.

2.2.2 Sob Ação de Campo DC

Influenciado por um campo elétrico DC o pacote de onda eletrônico executa movimento oscitório tipicamente conhecido como oscilações de Bloch. Este comportamento é demonstrado analiticamente em [12], onde se conclue que a probabilidade do elétron encontrar-se no n -ésimo sítio é dada pela expressão

$$p_n(t) = \left\{ J_n \left[\left(\frac{4w}{eEa} \right) \sin \left(\frac{eEat}{\hbar} \right) \right] \right\}^2. \quad (2.15)$$

Por sua vez, devido a propriedade das funções de Bessel $\sum_n n^2 J_n^2(z) = \frac{z^2}{2}$, mostra-se que o desvio quadrático médio é dado por

$$\langle n^2 \rangle = \left[\frac{8w^2}{(eEa)^2} \right] \sin^2 \left(\frac{eEat}{2\hbar} \right) \quad (2.16)$$

onde J_n é a função de Bessel de ordem n .

Estes resultados também são apresentados em [8] e [13].

2.2.3 Sob a Ação de Campo Elétrico AC

Sob a influência de um campo elétrico AC a energia no sítio se torna $\varepsilon - eF \sin(\omega t)na$ e, devido à esta energia oscilante uma gama de efeitos diferentes, porém não menos interessantes que os observados para um campo DC, se revelam.

Um dos efeitos distintos aos observados ao aplicar o campo DC é que, em geral, a probabilidade de cada sítio decai com o passar do tempo, indicando que a partícula inicialmente localizado difunde-se pela rede. Simultaneamente o valor quadrático médio, $\langle n^2 \rangle$, cresce indefinidamente [7] [14].

Em campo AC o pacote de onda eletrônico se comporta de modo diferente do visto em campo DC; A localização dinâmica que era regra a partir de um limiar de intensidade do campo elétrico agora é exceção e ocorre quando quando a razão entre a frequência da oscilação de Bloch induzida por um campo DC equivalente à amplitude do campo AC, F , e a frequência angular do campo AC for uma raiz da função de Bessel de ordem 0.

$$J_0 \left(\frac{\omega_F}{\omega} \right) = 0, \quad (2.17)$$

onde $\omega_F = eFa$. Estes resultados são obtidos em [12] e [14].

2.2.4 Sob a Ação de Campos DC e AC Sobrepostos

Considerando agora a localização dinâmica induzida pela sobreposição de campos elétricos DC, E , e AC, $F\cos(\omega t)$. Nessas condições, as oscilações induzidas pelo campo DC podem entrar em ressonância com o campo AC e, como consequência, a localização induzida por um campo suprimida pelo outro. A ressonância se fará presente quando a frequência das oscilações induzidas pelo campo DC for um múltiplo inteiro da frequência do campo AC [12] [14].

$$\omega_B = n\omega. \quad (2.18)$$

2.3 Vibrações da Redes Cristalinas Unidimensionais

Consideremos uma rede unidimensional de íons indistinguíveis com massa m situados em posições de equilíbrio a distância a do íon adjacente. Além disso, assumiremos que os íons possam realizar pequenas digressões em torno da posição de equilíbrio e que, quando isto acontece, suas ligações químicas dão origem a uma força restauradora proporcional a distância à posição de equilíbrio, de modo que possamos modelar a rede como um conjunto de osciladores harmônicos clássicos acoplados com constante elástica κ .

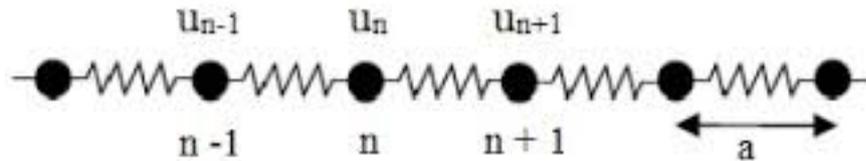


Figura 2 – Configuração dos sítios na rede cristalina

Tomemos o n -ésimo sítio. As energias potencial e cinética podem ser expressas por:

$$V = \kappa(u_{n-1} - u_n) + \kappa(u_{n+1} - u_n) \quad (2.19)$$

e

$$T = \frac{m}{2} \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2. \quad (2.20)$$

De posse destas informações podemos escrever a lagrangiana para o sítio

$$L = T - V \quad (2.21)$$

e utilizar a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v} \right) = 0 \quad (2.22)$$

a equação de força é determinada

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa (u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n). \quad (2.23)$$

O sistema de equações (2.23) é resolvido por ondas planas

$$u_n(t) = U e^{i(nka - \omega t)}. \quad (2.24)$$

Combinando as equações (2.24) e (2.23) obtemos a relação de dispersão

$$\omega^2 m U e^{i(nka - \omega t)} = \kappa U (e^{i((n+1)ka - \omega t)} + e^{i((n-1)ka - \omega t)} - 2e^{i(nka - \omega t)}),$$

$$-\omega^2 m = \kappa (e^{ika} + e^{-ika} - 2),$$

$$\omega^2(k) = \frac{2\kappa}{m} (1 - \cos(ka)). \quad (2.25)$$

Esta é a relação de dispersão das vibrações da rede. A periodicidade desta equação mostra que os valores de k que geram funções u_n distintas estão na faixa $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$. Pode-se mostrar que k assume apenas N valores distintos nesta faixa e, estes distintos valores caracterizam os possíveis modos normais de vibrações da rede, os fônons.

Uma exposição mais completa e detalhada sobre fônons pode se encontrada em [2], [3] ou [4],

2.4 A Interação Elétron-Fônon

Em relação aos modelos matemáticos utilizados para representar o modo como elétron e fônon interagem e estudar o efeito desta interação no comportamento eletrônico, três se destacam:

i) Hamiltoniano SSH (Su-Schrieffer-Heeger)

$$t_n = t_0 (1 - \alpha (u_{n+1} - u_n)). \quad (2.26)$$

ii) Hamiltoniano Holstein

$$H_{Holstein} = \sum_n \alpha u_n |n\rangle \langle n|. \quad (2.27)$$

iii) Hamiltoniano EYF (Economou - Yanovitskii -Fraggis)

$$H_{EYF} = \sum_n \alpha |n\rangle \langle n| (u_{n+1} - u_{n-1}). \quad (2.28)$$

Como em [15], aqui utilizaremos o modelo EYF como Hamiltoniano de interação H_{e-l} . Uma excelente análise comparativa dos modelos SSH e Holstein pode ser encontrada em [16].

O Hamiltoniano total do sistema é formado por 3 partes:

$$.H = H_e + H_l + H_{e-l} \quad (2.29)$$

Onde H_e é o Hamiltoniano eletrônico visto nos capítulos anteriores

$$H_e = (\epsilon - E_n a) \sum_n |n\rangle \langle n| - w \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|), \quad (2.30)$$

H_l é o Hamiltoniano fonônico clássico, correspondente à energia da rede

$$H_l = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + \frac{\kappa}{2} (u_{n+1} - u_n)^2, \quad (2.31)$$

e H_{e-l} o Hamiltoniano de interação é dado por

$$H_{e-l} = \sum_n \alpha |n\rangle \langle n| (u_{n+1} - u_{n-1}). \quad (2.32)$$

Pela expansão dos coeficientes da função de onda eletrônica, obtemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_n = (\epsilon - eE_n a) C_n - w(C_{n-1} + C_{n+1}) + \alpha(u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (2.33)$$

e a equação de força responsável pelo deslocamento dos sítios

$$m \frac{d^2}{dt^2} u_n = \kappa(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) + \alpha(|C_{n+1}|^2 - |C_{n-1}|^2)$$

que pode ser convertida em um par de equações diferenciais de primeira ordem

$$\frac{d}{dt} u_n = v_n$$

e

$$m \frac{d}{dt} v_n = \kappa(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) + \alpha(|C_{n+1}|^2 - |C_{n-1}|^2). \quad (2.34)$$

As equações (2.33) e (2.34) descrevem o sistema físico analisado e sua implementação computacional exige a manipulação de valores numéricos extremamente pequenos, como o parâmetro da rede que é da ordem de grandeza de $10^{-10}m$, o que pode provocar anomalias numéricas que gerariam resultados enganosos. Esta complicação pode ser contornada escrevendo as equações adimensionalmente. Para tanto, tomemos w como unidade de energia e $\sqrt{\frac{w}{\kappa}}$ como unidade de medida do deslocamento dos íons. Dividindo a equação a equação (2.33) por w e multiplicando seu componente mecânico por $\sqrt{\frac{\kappa}{w}}$ obtemos

$$i \frac{\hbar}{w} \frac{d}{dt} C_n = \left(\frac{\varepsilon}{w} - \frac{eEan}{w} \right) C_n - (C_{n-1} + C_{n+1}) + \frac{\alpha}{w} \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa}} (u_{n+1} - u_{n-1}),$$

$$i \frac{d}{d\left(\frac{w}{\hbar} t\right)} C_n = \left(\frac{\varepsilon}{w} - \frac{eEan}{w} \right) C_n - (C_{n-1} + C_{n+1}) + \frac{\alpha}{\sqrt{w\kappa}} \frac{(u_{n+1} - u_{n-1})}{\sqrt{\frac{w}{\kappa}}}.$$

eEa possui inidade de energia, $\sqrt{\frac{w}{\kappa}}$ é a unidade de distância fonônica e, assumindo que a constante de acoplamento tenha unidade $\sqrt{w\kappa}$ e a unidade de tempo eletrônico seja $\frac{\hbar}{w}$, temos que todos os termos da equação acima são adimensionais, de modo que ela pode ser escrita da forma

$$i \frac{d}{d\tau_e} C_n = -(C_{n-1} + C_{n+1}) + (\tilde{\varepsilon} - \eta E n) C_n + \tilde{\alpha} (\tilde{u}_{n+1} - \tilde{u}_{n-1}). \quad (2.35)$$

A primeira das equações no par (2.34) assume forma adimensional quando multiplicada por $\sqrt{\frac{m}{w}}$ e adicionalmente, seu primeiro membro é multiplicado por $\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$:

$$\sqrt{\frac{m}{w}} \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa}} \frac{d}{dt} u_n = \sqrt{\frac{m}{w}} v_n,$$

$$\frac{d}{d\left(\sqrt{\frac{\kappa}{m}} t\right)} \left(\frac{u_n}{\sqrt{\frac{w}{\kappa}}} \right) = \frac{v_n}{\sqrt{\frac{w}{m}}}.$$

$\sqrt{\frac{w}{m}}$ tem unidade de velocidade e, adotando $\sqrt{\frac{m}{\kappa}}$ como unidade de tempo fonônico, todos os termos da equação acima são adimensionais, e esta pode ser escrita na forma:

$$\frac{d}{d\tau_l} \tilde{u}_n = \tilde{v}_n. \quad (2.36)$$

Por sua vez, para tornar a segunda equação do par (2.34) adimensional, basta dividi-la por $\sqrt{w\kappa}$:

$$\frac{m}{\sqrt{w\kappa}} \frac{d}{dt} v_n = \frac{\kappa}{\sqrt{w\kappa}} (u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) + \frac{\alpha}{\sqrt{w\kappa}} (|C_{n+1}|^2 - |C_{n-1}|^2),$$

$$\frac{d}{d\left(\sqrt{\frac{\kappa}{m}}t\right)} \frac{v_n}{\sqrt{\frac{w}{m}}} = \frac{(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1})}{\sqrt{\frac{w}{\kappa}}} + \frac{\alpha}{\sqrt{w\kappa}} (|C_{n+1}|^2 - |C_{n-1}|^2).$$

Com isso, a segunda equação do par (2.34) toma a forma.

$$\frac{d}{d\tau_l} \tilde{v}_n = (\tilde{u}_{n-1} - 2\tilde{u}_n + \tilde{u}_{n+1}) + \tilde{\alpha} (|C_{n+1}|^2 - |C_{n-1}|^2) \quad (2.37)$$

Com o procedimento acima as três equações de movimento tomam forma adimensional e as unidades de medida estabelecidas: $[\alpha] = \sqrt{w\kappa}$ para a constante de acoplamento, $[E] = \frac{w}{ea}$ para campo elétrico, $[t_e] = \frac{\hbar}{w}$ para o tempo eletrônico, $[t_l] = \sqrt{\frac{m}{\kappa}}$ para o tempo fonônico, $[D_l] = \sqrt{\frac{w}{\kappa}}$ para distância fonônica, $[D_e] = a$ para distância eletrônica e $[Energia] = w$ para a energia. Um último empecilho à implementação ainda não foi contornado: A unidade de tempo na equação (2.35) não é a mesma utilizada nas equações (2.36) e (2.37). Para solucionar este problema basta multiplicar a equação (2.35) pela razão entre o tempo eletrônico e o tempo fonônico $r_t = \frac{\tau_l}{\tau_e} = \frac{w}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{\kappa}}$:

$$i \frac{w}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{\kappa}} \frac{d}{d\tau_e} C_n = r_t [-(C_{n-1} + C_{n+1}) + (\tilde{\epsilon} - \eta_{En}) C_n + \tilde{\alpha} (\tilde{u}_{n+1} - \tilde{u}_{n-1})],$$

$$i \frac{d}{d\tau_l} C_n = r_t [-(C_{n-1} + C_{n+1}) + (\tilde{\epsilon} - \eta_{En}) C_n + \tilde{\alpha} (\tilde{u}_{n+1} - \tilde{u}_{n-1})]. \quad (2.38)$$

O sistema composto pelas 3N equações representadas em (2.38), (2.36) e (2.36), um trio para cada sítio da rede, foi resolvido numericamente utilizando o método de Runge-Kutta de 4º ordem.

De posse das probabilidades eletrônicas em cada sítio, e dos deslocamentos e velocidades dos mesmos, medidas que permitem acompanhar o elétron e o fónon foram realizadas.

A análise da parte eletrônica foi feita por meio da avaliação probabilidade de localizá-lo em cada sítio $p_n(t) = |C_m(t)|^2$, que nos permite acompanhar sua localização; do desvio quadrático médio (2.9); da função de participação eletrônica (2.11); a probabilidade de retorno (2.10).

Para a análise do fônon foram avaliados o campo de deformação fonônica

$$\Delta_m \equiv (u_{m+1} - u_{m-1})^2 \quad (2.39)$$

e a função de participação fonônica

$$P_l(t) = \frac{E_l^2(t)}{\sum_n \varepsilon_{ln}^2(t)}, \quad (2.40)$$

onde ε_{ln} é a energia local da rede simetrizada

$$\varepsilon_{ln} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{4}k[(u_{n+1} - un)^2 + (u_{n-1} - un)^2]. \quad (2.41)$$

O pólaron, por consistir no acoplamento do elétron com o fônon, tem sua localização determinada a cada instante por

$$\prod_n(t) = |C_n(t)|^2 x \Delta_n. \quad (2.42)$$

Uma formulação semelhante a esta é feita por Herrero e Domínguez [17] considerando o modelo de Holstein.

3 Resultados

3.1 Elétron em um potencial periódico

3.1.1 Livre da influência de campos elétricos externo

Para investigar a dinâmica do elétron isento da influência de campos elétricos externos, três casos, distinguíveis entre si pela velocidade inicial dada ao pacote de onda, foram analisados. Estes casos são identificados pelos vetores de onda associados: $k=0$, $k=-0.3$ e $k=0.5$.

A figura 3 mostra o pacote de onda eletrônico para o caso $k = 0.0$. Alí vemos que o centro do pacote não se afasta da sua posição inicial e, a medida que o tempo passa, o elétron espalha-se indistintamente para os dois sentidos da rede. Chega-se a estas mesmas conclusões ao analisar a evolução do centróide e da participação eletrônica na figura 6.

As figuras 4 e 5 mostram os pacotes de onda eletrônicos para $k = -0.3$ e $k = 0.5$, respectivamente. Alí vê-se que o pacote toma a direção da velocidade a ele atribuída inicialmente e espalha-se pela rede enquanto movimenta-se à taxa consideravelmente menor que a apresentada no caso $k = 0.0$.

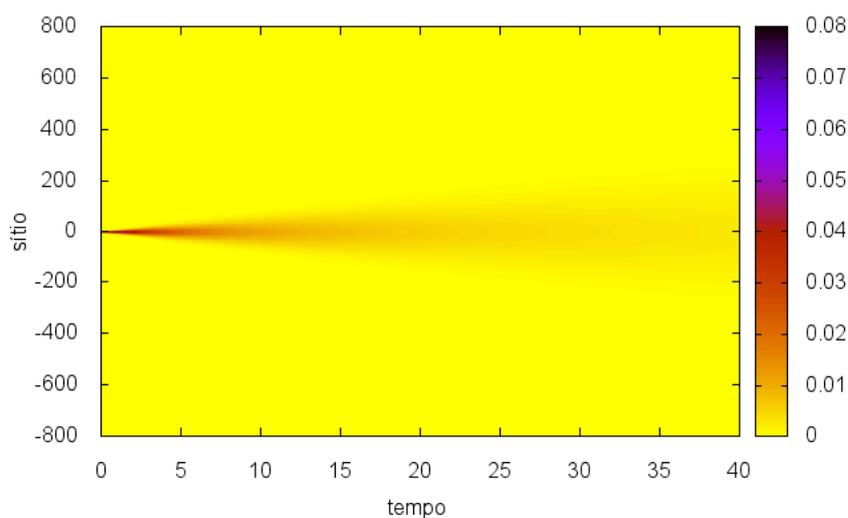


Figura 3 – Amplitude de probabilidade para o elétron com vetor de onda $k=0.0$.

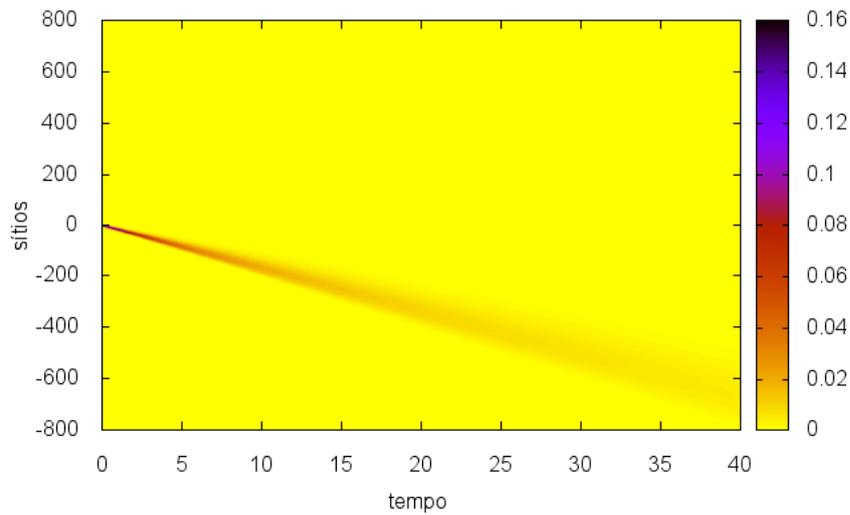


Figura 4 – Amplitude de probabilidade para o elétron com vetor de onda $k=-0.3$.

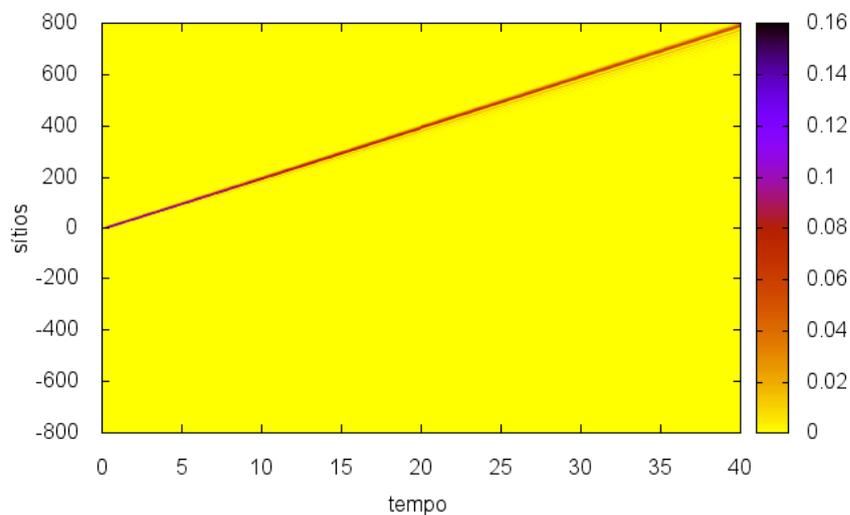


Figura 5 – Amplitude de probabilidade para o elétron com vetor de onda $k=0.5$.

A Figura 6 mostra as medidas representadas pelas equações (2.10), (2.9), (2.11) e (2.12). Sua análise mostra que, nos três casos considerados, o desvio quadrático médio tende a crescer, caracterizando a difusão do elétron pela a rede. Pode-se chegar à mesma conclusão analisando a função participação para cada caso, pois $P_e(t)$ é crescente no tempo.

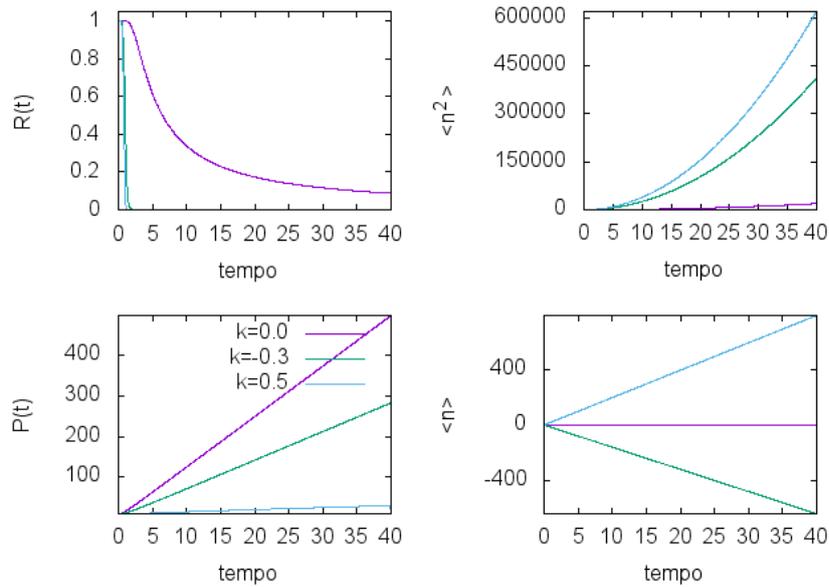


Figura 6 – Probabilidade de retorno, participação, desvio quadrático médio e centróide em função do para $k=0$, $k=-0.3$ e $k=0.5$.

Nos três casos analisados a partícula apresentou comportamentos semelhantes, espalha-se pela rede; porém, as condições iniciais do pacote influenciam a velocidade do seu espalhamento. Quando dado um momento inicial ao pacote, figuras 4 e 5, este se espalha mais lentamente. Este efeito pode ser compreendido a partir do princípio da incerteza, $\delta x \times \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, cuja interpretação diz que, dado um aumento atribuído ao momento da partícula tem por contrapartida uma redução na incerteza em sua posição.

O espalhamento também pode ser verificado pelo monitoramento da função participação, $P(t)$, cuja tendência apresentada foi de crescer até assumir o mesmo valor da quantidade de sítios da rede. O crescimento exacerbado do desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$ também serviu como um forte indicador da tendência de difusão do elétron. Isto demonstra que, nas condições estabelecidas, a rede cristalina apresenta características de um condutor isotrópico.

3.1.2 Sob influência de campo elétrico DC

Com o propósito de visualizar o efeito do campo elétrico sobre a difusão eletrônica, foram analisados três casos típicos onde as oscilações de Bloch podem ser facilmente visualizadas. Em cada caso o campo elétrico aplicado tinha intensidade $\eta_E = 0.1$ e, para distinguí-los, sutis modificações foram feitas em suas condições iniciais, ora na quantidade de sítios ocupadas pelo pacote ora no momento dado ao pacote.

Inicialmente consideramos o pacote de onda do elétron completamente localizado em um único sítio do cristal, $\sigma = 0$.

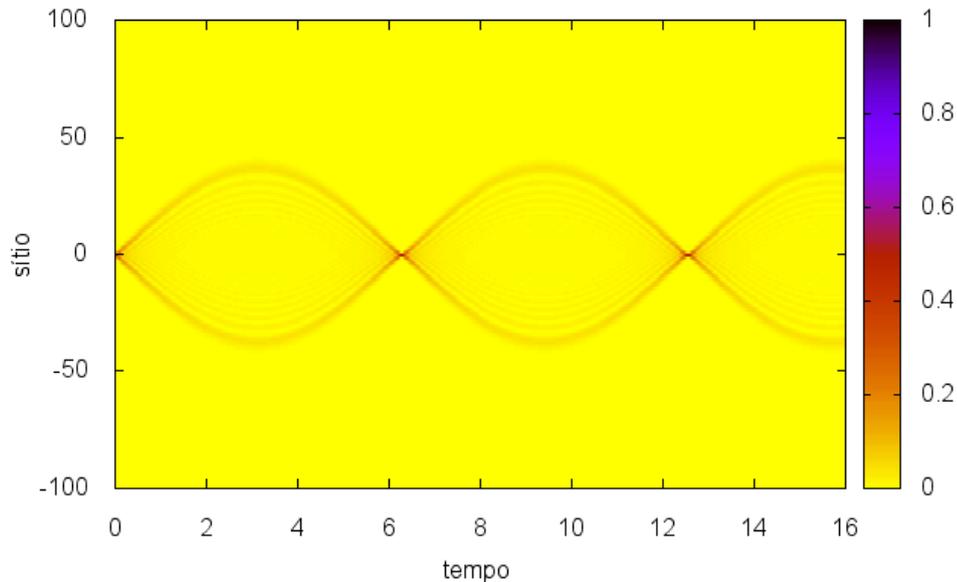


Figura 7 – Evolução do pacote de onda para $\sigma = 0$, $k=0$ e campo elétrico $\eta_E = 0.1$.

A figura 7 mostra o pacote executando um movimento oscilatório tomando a forma de uma onda estacionária.

No segundo caso analisado, consideramos como estado inicial do elétron uma gaussiana com dispersão $\sigma = 4$. Este caso representa de maneira mais precisa o sistema físico correspondente a um elétron em um cristal 1D sob influência de um campo elétrico externo [12].

A figura 8 mostra o deslocamento do pacote de onda com o passar do tempo. As características oscilatórias como período, amplitude, e o ponto onde o movimento cessa momentaneamente e reenicia na direção oposta, os pontos de retorno, são facilmente visualizadas. Esta figura também evidencia que próximos aos pontos de retorno o pacote de onda localiza-se sobre uma pequena quantidade de sítios. Isto pode ser visto ainda acompanhando a participação eletrônica no decorrer do tempo na figura 10.

Como terceiro caso tomamos o pacote com características gaussianas analisado no exemplo anterior e demos uma velocidade caracterizada pelo vetor de onda $k = -0.3$.

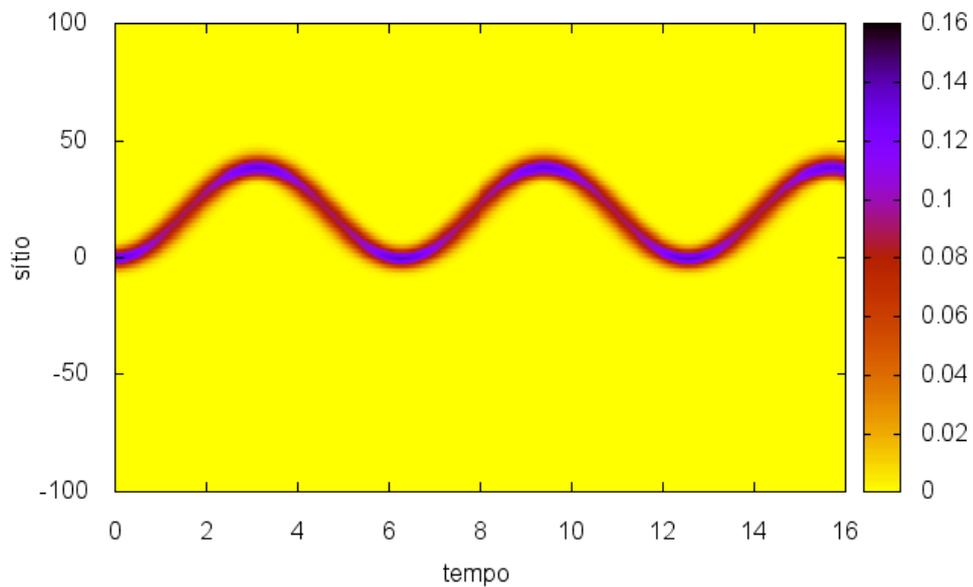


Figura 8 – Evolução do pacote de onda para $\sigma = 4$, $k = 0$ e campo elétrico $\eta_E = 0.1$.

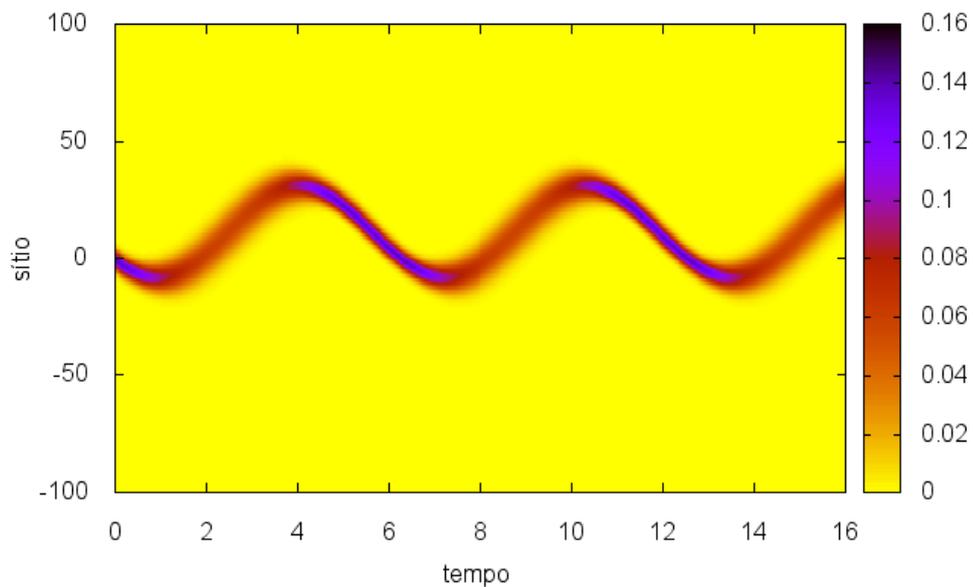


Figura 9 – Evolução do pacote de onda para $\sigma = 4$, $k = -0.3$ e campo elétrico $\eta_E = 0.1$.

Do mesmo modo que no exemplo anterior, o pacote executa o movimento oscilatório porém, ao iniciar o movimento, ele toma a direção da velocidade dada. Isto é visto na figura 9. Outra distinção em relação ao exemplo precedente é que o pacote

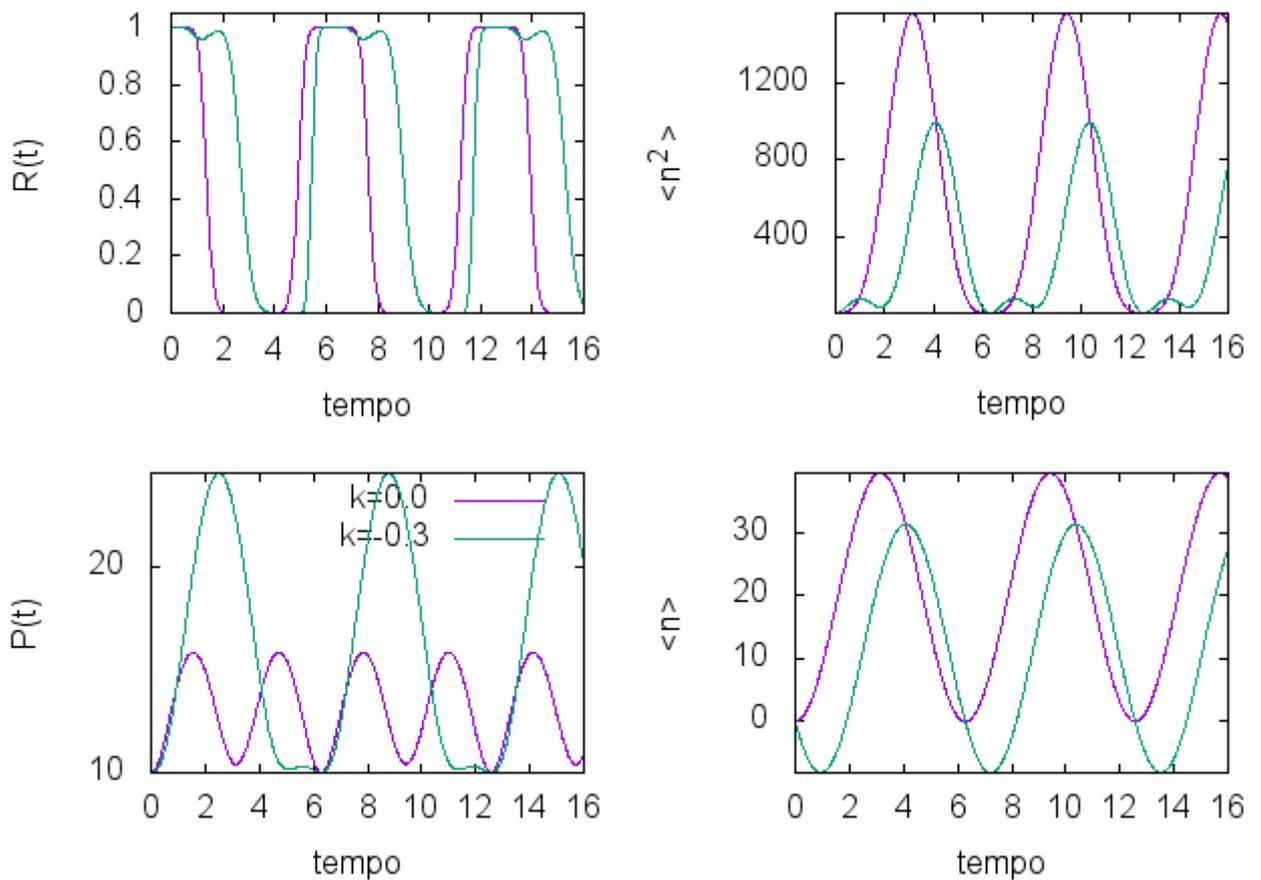


Figura 10 – Probabilidade de retorno, desvio quadrático médio participação eletrônica e centróide para os parâmetros fixos $\sigma = 4$, campo elétrico $\eta_E = 0.1$ e vetores de onda $k = 0.0$ e $k = -0.3$.

de onda passa a ocupar a menor quantidade de sítios entorno dos pontos de inflexão da figura, e não mais nos pontos de retorno.

Nos dois últimos casos analisados o pacote manteve-se coeso ao deslocar-se pela rede. Nessas circunstâncias, o centróide poderia ser utilizado para visualizar suas oscilações. A figura 10 mostra os centróides oscilando em fase com seus respectivos pacotes nas figuras 8 e 9, os desvios quadráticos médios validando a equação (2.16), as probabilidades de retorno e as funções participações eletrônicas.

Estes exemplos demonstram que sob a influência de um campo elétrico suficientemente intenso o elétron começa a oscilar ao invés de difundir pela rede, isto é, a rede que na ausência do campo elétrico apresentava características de condutor, imerso no campo apresenta uma região condutora envolta em uma barreira que impede a difusão do elétron. Além disso, fica claro que as condições iniciais do pacote de onda influenciam profundamente as características da oscilação de Bloch por ele executada.

3.1.3 Sob influência de campo elétrico AC

Para verificar a validade da condição imposta pela equação (2.17), a dinâmica da partícula foi analisada para quatro valores de $\frac{\omega_F}{\omega}$ que exemplificam o comportamento típico do pacote de onda sob influência de campo elétrico senoidal: 2, 2.405, 5.520 e 7.

Na figura 11 são mostrados os desvios quadráticos médios do pacote de onda para estes quatro valores. Para $\frac{\omega_F}{\omega}$ inteiro, a pacote inicialmente localizado espalha-se pela rede. Por outro lado, para $\frac{\omega_F}{\omega} = 2.405$ ou $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.520$, raízes da função de Bessel de ordem 0, o pacote mantém-se coeso e

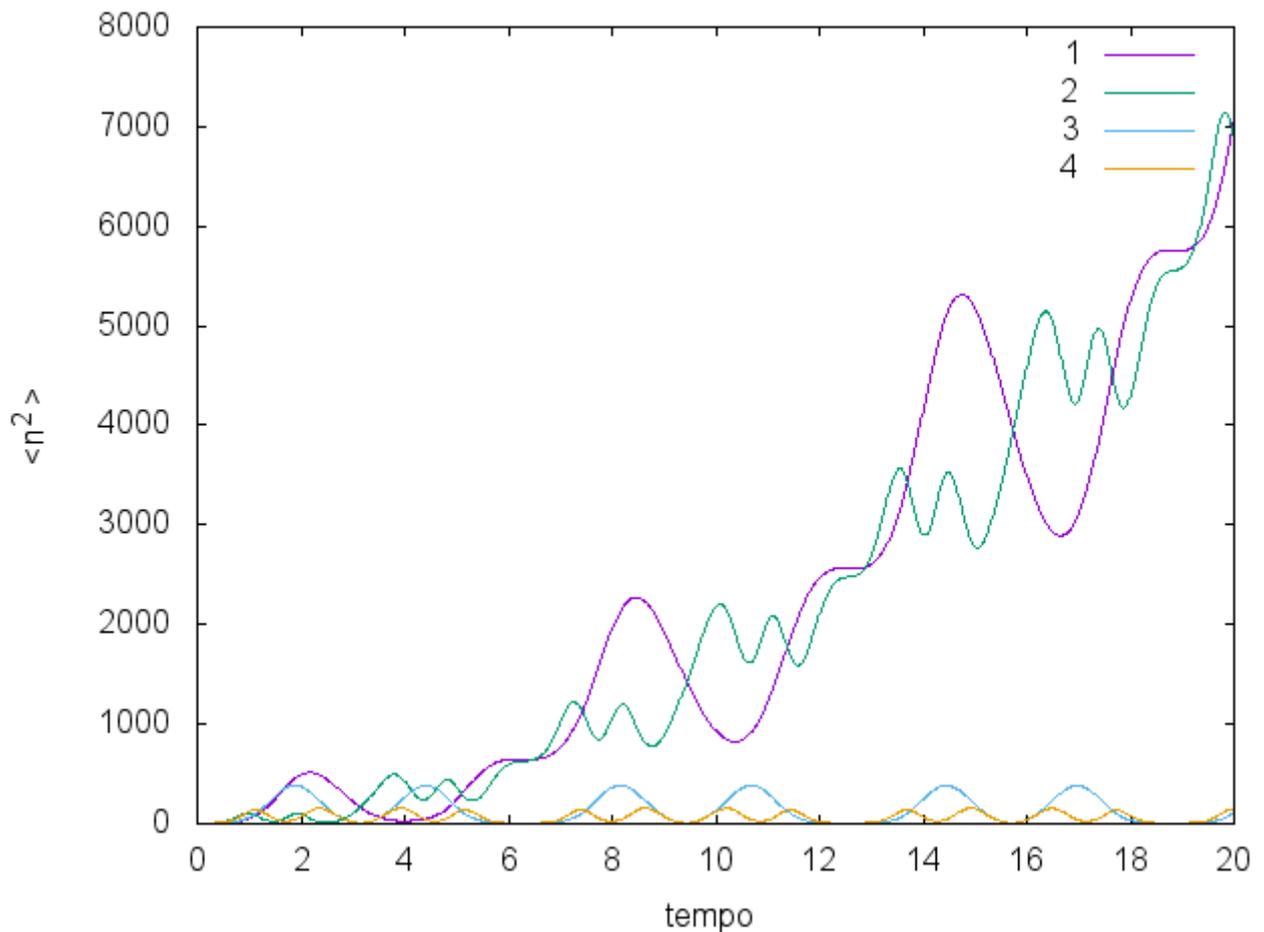


Figura 11 – Desvio quadrático médio para Curva 1: $\frac{\omega_F}{\omega} = 2$; Curva 2: $\frac{\omega_F}{\omega} = 7$, Curva 3: $\frac{\omega_F}{\omega} = 2.405$ e Curva 4: $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.520$.

oscilando, apresentando as características típicas de uma partícula dinamicamente localizada, análogas as vistas para o campo DC. Nesta figura fica claro o papel do desvio quadrático médio para a identificação da localização dinâmica.

A figura 12 mostra a evolução do pacote de onda para $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.520$, a segunda raiz da função de Bessel de ordem 0. Alí fica evidente a manutenção da coesão do

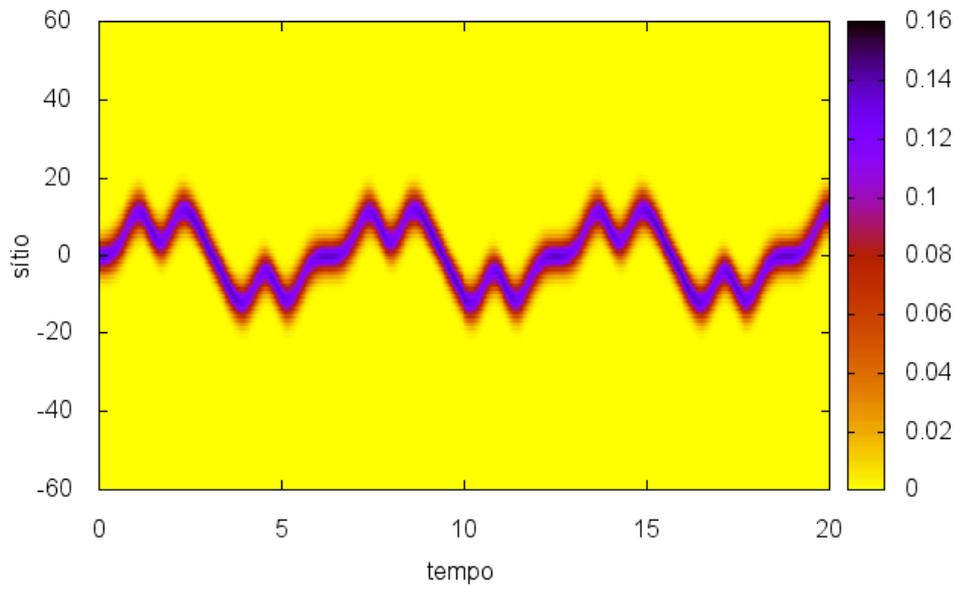


Figura 12 – Evolução do pacote de onda para $\frac{\omega_E}{\omega} = 5.520$.

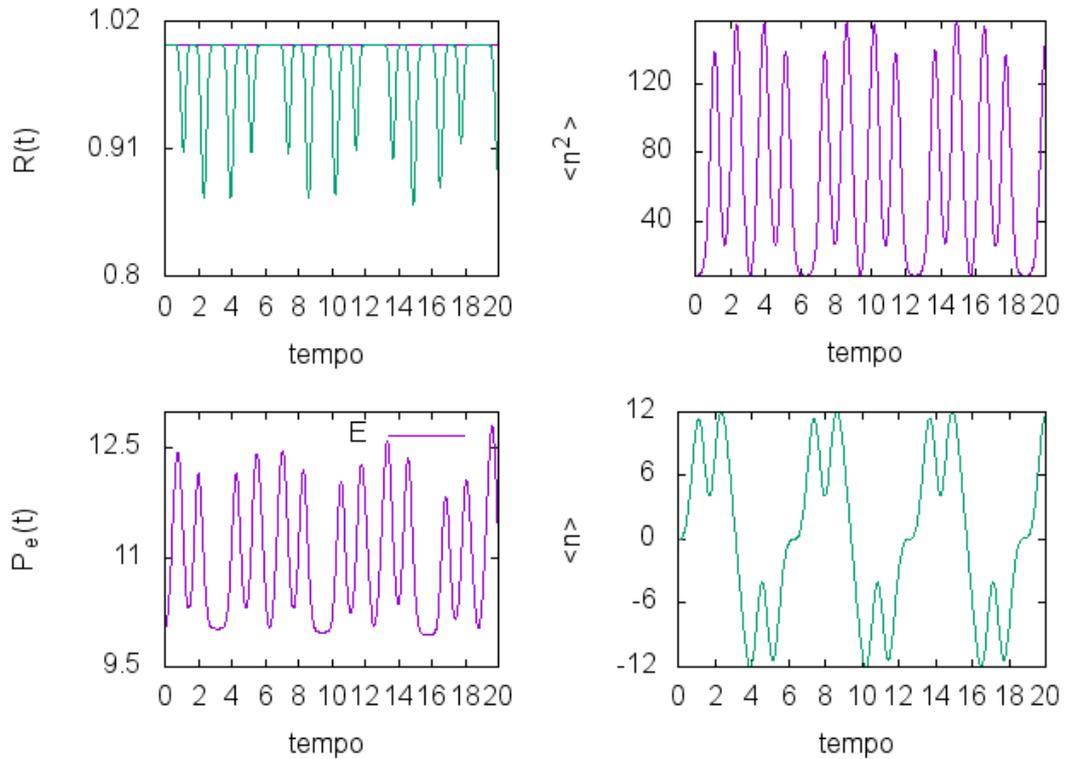


Figura 13 – probabilidade de retorno $R(t)$, desvio quadrático médio, $\langle n^2 \rangle$, Participação, $P_e(t)$, e centróide para o parâmetro $\frac{\omega_E}{\omega} = 5.520$.

pacote com o passar do tempo e o movimento oscilatório por ele executado.

Distinções geométricas entre os regimes oscilatórios induzidos por campos DC e AC podem ser identificadas comparando a figura 8 com a 12. Enquanto o campo DC induz oscilações semelhantes a senóides puras, o campo AC provoca oscilações que possuem pontos de retorno intermediários e um ponto de inflexão no fim de cada período onde a partícula, momentaneamente, localiza-se sobre uma quantidade ínfima de sítios. Na figura 13, a função participação assume valores muito baixos duas vezes a cada período de oscilação. Estes valores ocorrem no instante em que a oscilação passa por uma inflexão. No segundo momento, o valor da participação decai abruptamente. Este instante caracteriza o fim do período de oscilação, onde o elétron momentaneamente ocupa uma quantidade mínima de sítios.

3.1.4 Sob influência de campos elétricos DC e AC Sobrepostos

Para visualizar este efeito da ação simultânea dos campos DC e AC sobre o elétron, fixamos $\frac{\omega_F}{\omega}$ em 5.5201, a segunda raiz da função de Bessel de ordem 0, para

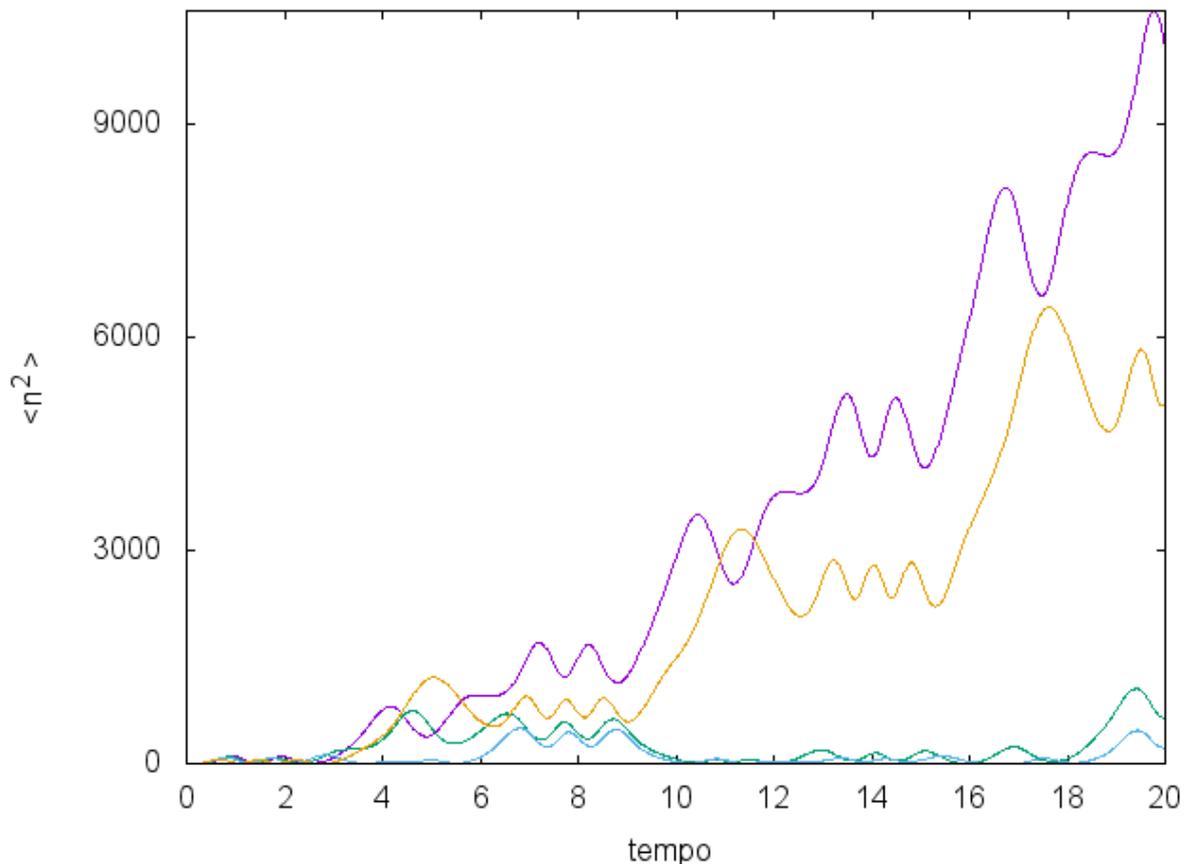


Figura 14 – Desvio quadrático médio para $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.5201$; Curva 1: $\mu = 1$, curva 2: $\mu = \sqrt{2}$, curva 3: $\mu = \sqrt{3}$, curva 4: $\mu = 3$.

garantir a localização, e analisamos a dinâmica do pacote para quatro valores distintos de $\mu = \frac{\omega_B}{\omega}$.

A figura 14 mostra o desvio quadrático médio obtido para estes quatro valores. Para $\mu = \sqrt{2}$ e $\mu = \sqrt{3}$ a localização induzida pelo campo AC é preservada. Por outro lado, para $\mu = 1$ e $\mu = 3$, casos em que a frequência de Bloch é múltiplo da frequência do campo AC, os dois movimentos harmônicos induzidos pelos campos ficam em ressonância, e como consequência, a localização é destruída.

3.2 Interação elétron-fônon

3.2.1 Livre de influência de campos externos

Para analisar o efeito da interação elétron-fônon sobre a dinâmica do elétron e o comportamento da rede induzido por esta interação, consideramos um primeiro caso em que a influência do campo elétrico sobre o sistema é nula e a constante de acoplamento é $\alpha = 0.8$.

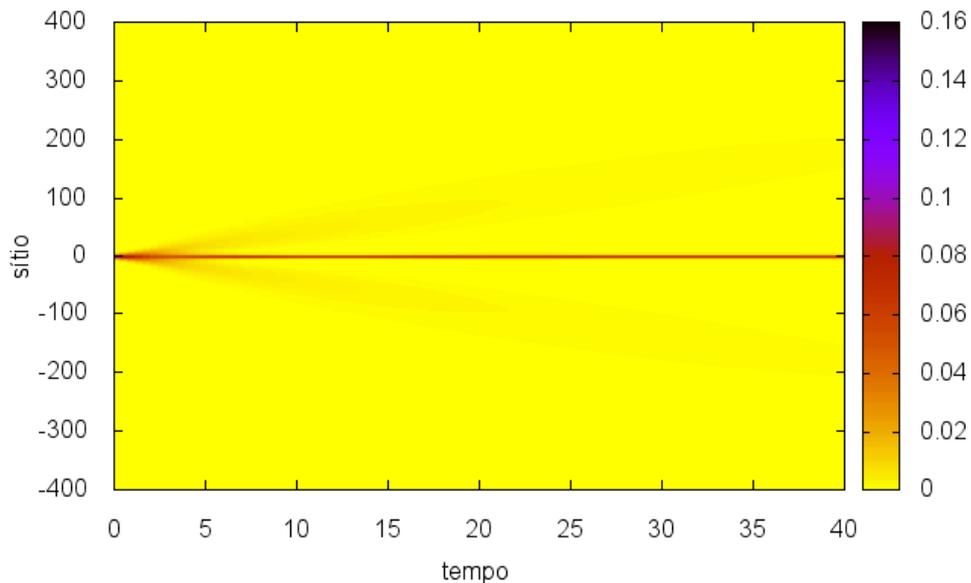


Figura 15 – Evolução temporal do elétron para $\alpha = 0.8$, $k = 0.0$, $\eta_E = 0$ e $\eta_F = 0$.

A análise é feita por meio de três figuras que correspondem à evolução temporal do elétron, do fônon e do pólaron.

A figura 15 mostra a evolução temporal do elétron. Nela vemos que o elétron divide-se em três partes, das quais, duas escapam simetricamente em relação à posição

inicial do centro do pacote de onda e a terceira mantém-se localizada nesta mesma posição. Ao comparar Esta figura com a figura 3 vemos que a interação elétron-fônon gerou uma armadilha que aprisionou parte do pacote de onda eletrônica.

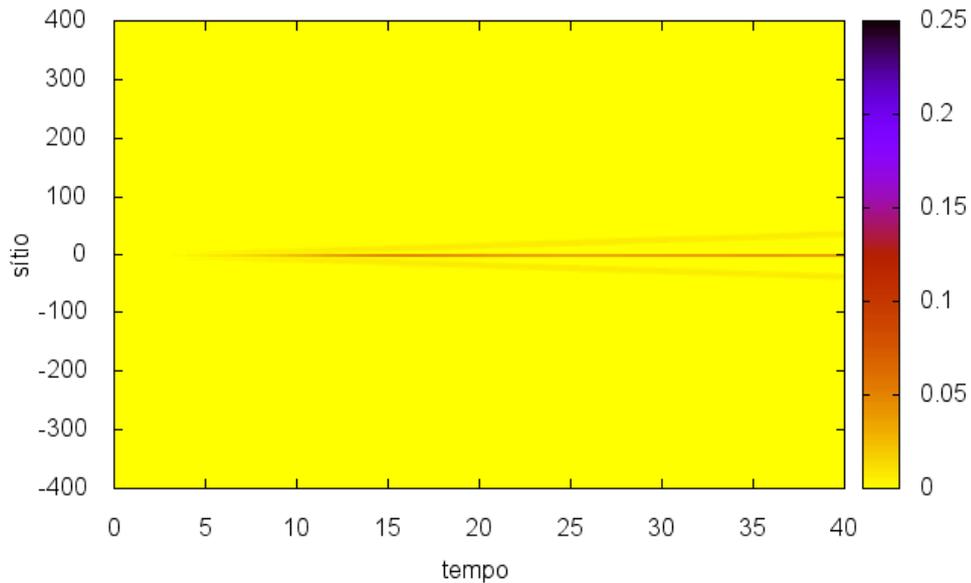


Figura 16 – Evolução temporal do fônon para $\alpha = 0.8$, $k = 0.0$, $\eta_E = 0$ e $\eta_F = 0$.

A figura 16 mostra a evolução temporal do fônon. Nela observamos que a perturbação gerada no sítio onde inicialmente se localizava o centro do pacote de onda eletrônico divide-se em três partes e, estas partes tendem a acompanhar as partes na quais se dividiu o pacote de onda, sendo que a parte mais intensa mantém-se localizada na mesma região em que parte do pacote de onda eletrônico está localizado. A comparação das figuras 14 e 15 mostra que a velocidade de escape da onda eletrônica é maior que 4 vezes a velocidade de escape do fônon.

A localização do elétron e do fônon entorno do sítio central caracteriza a formação do pólaron e propagação do pólaron. Tal formação e a evolução temporal do pólaron são mostradas na figura 17, onde o pólaron mantém-se localizado na região onde foi formado.

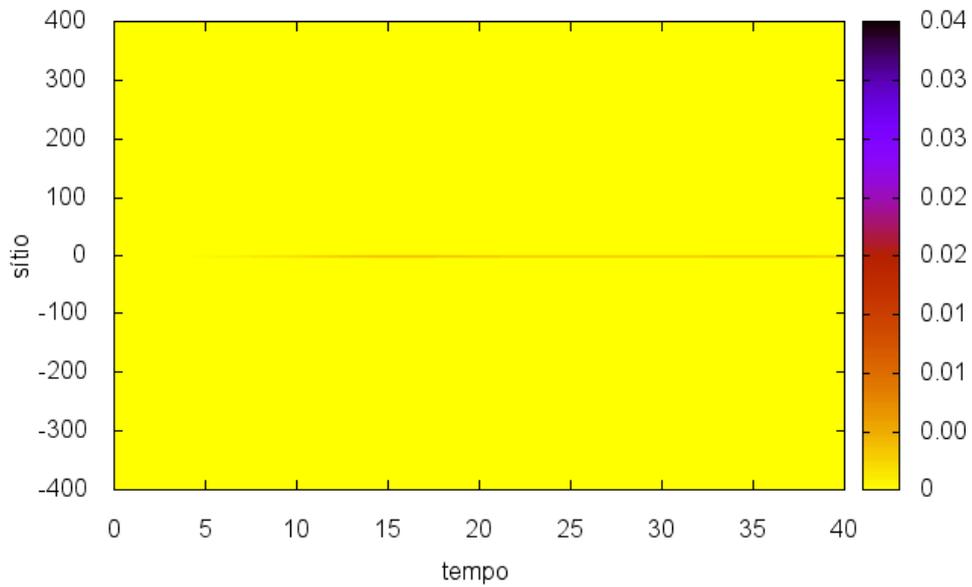


Figura 17 – Evolução temporal do pólaron para $\alpha = 0.8, k = 0.0, \eta_E = 0$ e $\eta_F = 0$.

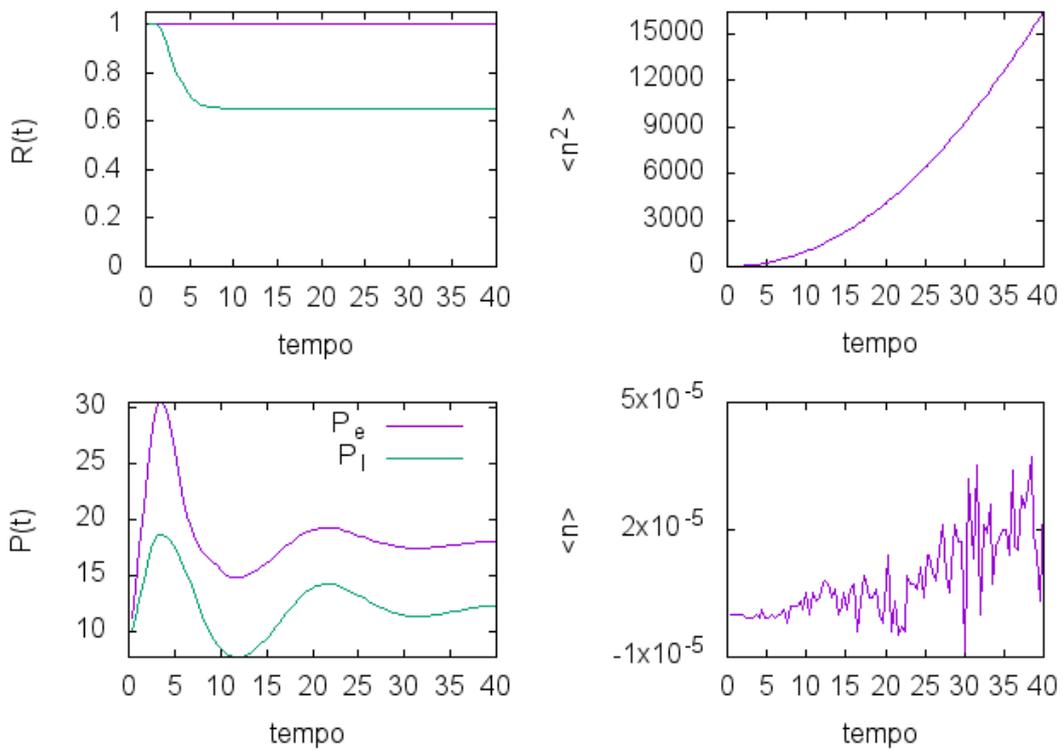


Figura 18 – Probabilidade de retorno $R(t)$, desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$, funções participação eletrônica $P_e(t)$ e fonônica $P_l(t)$ e o centróide $\langle n \rangle$ para $\alpha = 0.8, k = 0.0, \eta_E = 0.0$ e $\eta_F = 0.0$.

Na figura 18 verifica-se que probabilidade de retorno $R(t)$, cujo valor reafirma a ideia de localização. O desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$, que cresce rapidamente devido às partes do pacote que se propagam simetricamente em relação ao seu centro e difundem-se pela rede. As funções de participação eletrônica e fonônica.

A análise deste exemplo mostra que a interação elétron-fônon modifica radicalmente as características da rede inibindo parcialmente a mobilidade eletrônica. O elétron que, como visto na sessão 1.3, difundia-se facilmente pela rede, agora mantém-se parcialmente aprisionado em sua posição original.

3.2.2 Sob influência de campo elétrico DC

Inicialmente analisemos o caso em que o elétron está dinamicamente localizado por um campo elétrico DC de intensidade $\eta_E = 0.01$ e a constante de interação $\alpha = 1.5$.

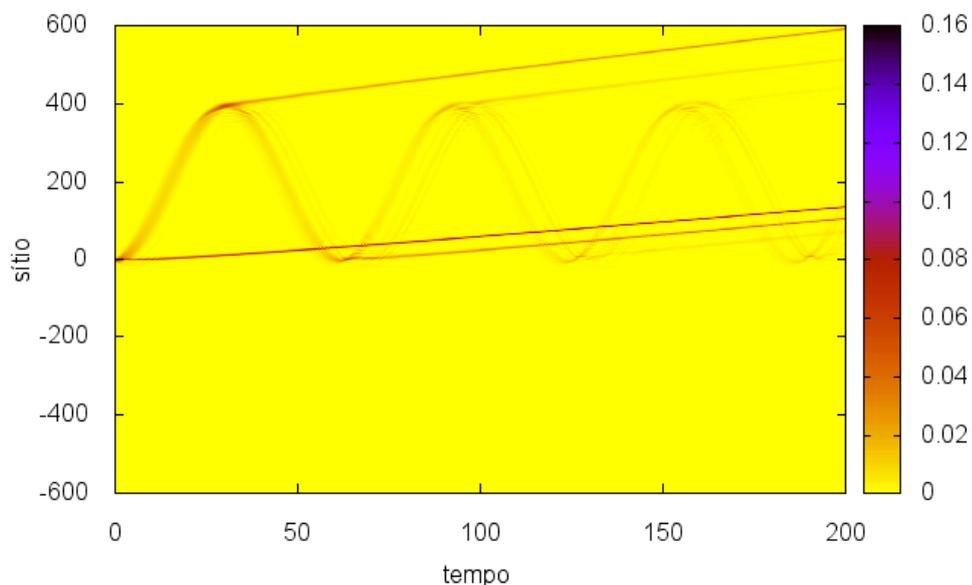


Figura 19 – Evolução do pacote de onda eletrônico para os parâmetros $\eta_E = 0.01$ e $\alpha = 1.0$.

A figura 19 mostra o pacote de onda eletrônico executando oscilações de Bloch. Durante o movimento, componentes do pacote são ejetadas nos pontos de retorno e propagam-se na direção do campo. A parte que se mantém executando oscilação de Bloch perde intensidade e, devido a interação elétron-fônon, espalha-se pela rede.

Nos mesmos pontos de retorno, diversas linha de fônons são criadas e acompanham os componentes do pacote de onda eletrônica. Isto é justamente o processo de

formação do pólaron. A figura 20 mostra a criação dos fônons e sua propagação pela rede com o passar do tempo.

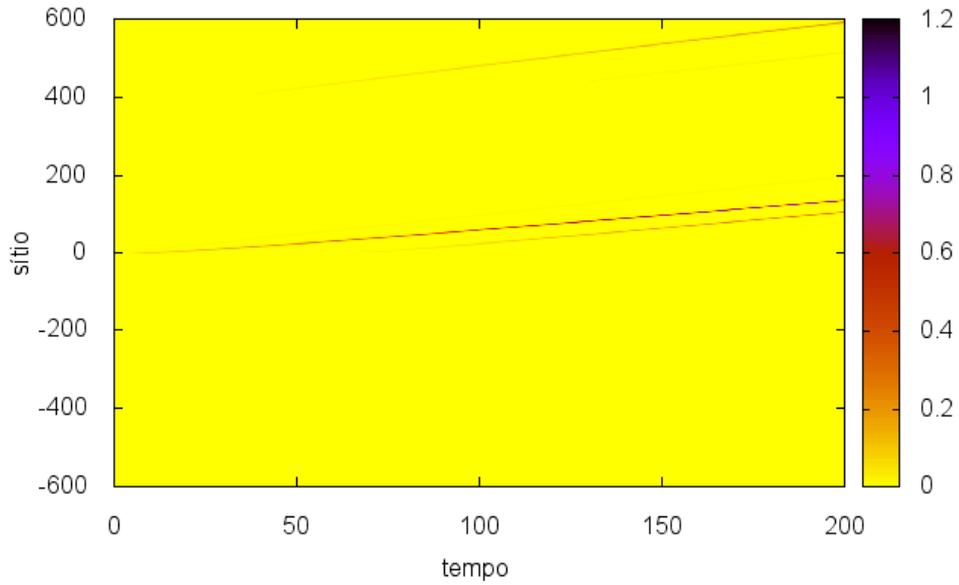


Figura 20 – Evolução do campo de deformação fonônica para os parâmetros $\eta_E = 0.01$ e $\alpha = 1.0$.

A figura 21 mostra a dinâmica do pólaron como definido na equação (2.42).

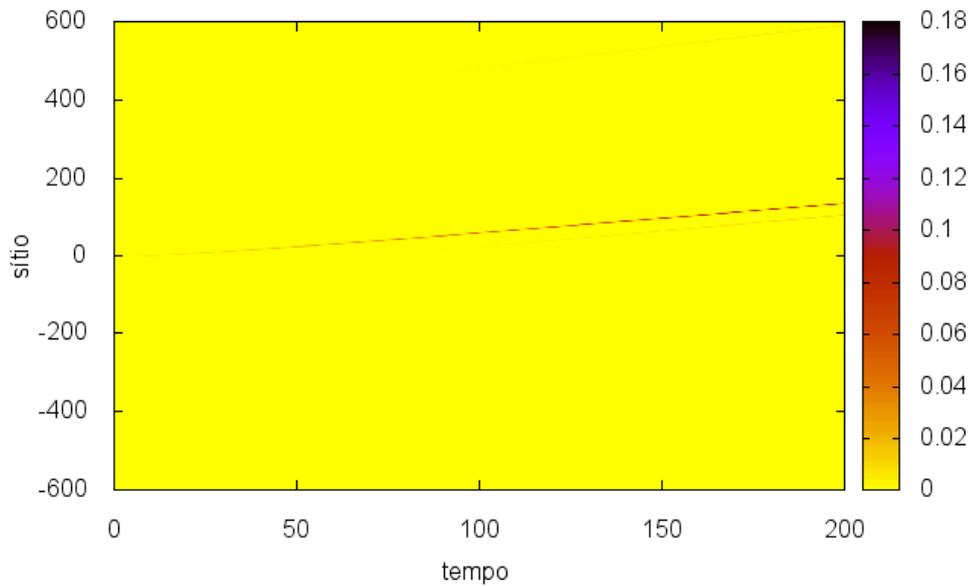


Figura 21 – Evolução do pólaron para os parâmetros $\eta_E = 0.01$ e $\alpha = 1.0$.

Este exemplo mostra, que ao executar oscilações de Bloch, parcelas do pacote de onda eletrônico se despreendem nos pontos de retorno carregando consigo fônons. Este processo caracteriza a formação do pólaron que, devido a sua parcela eletrônica e a baixa intensidade da interação, se propagam na direção do campo elétrico.

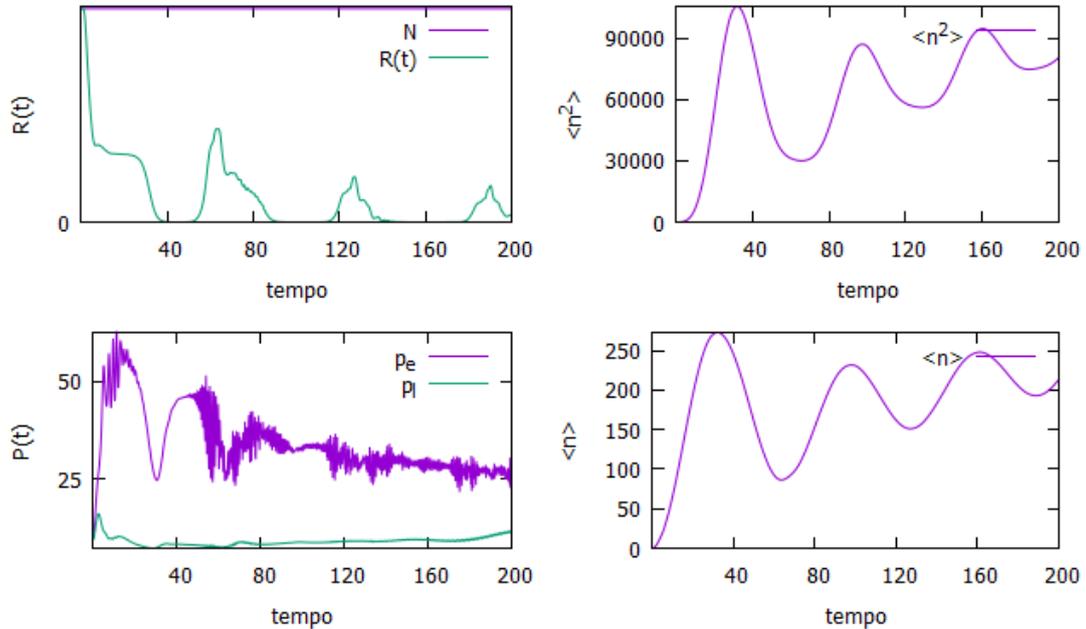


Figura 22 – Probabilidade de retorno $R(t)$, desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$, funções participação eletrônica $P_e(t)$ e fonônica $P_l(t)$ e o centróide $\langle n \rangle$ para os parâmetros $\alpha = 1.0$, $k = 0.0$, $\eta_E = 0.01$ e $\eta_F = 0.0$.

Na figura 22, o desvio quadrático médio e probabilidade de retorno evidenciam a difusão do elétron pela rede; a participações eletrônica e fonônica demonstram que as vibrações da rede ocupam uma quantidade de sítios relativamente grande em torno do elétron.

Como segundo exemplo foi analisado o caso em que esta presente intenso campo elétrico, $\eta_E = 0.09$, e forte acoplamento entre o elétron e rede, $\alpha = 2.0$.

A figura 23 mostra a evolução do pacote de onda eletrônico. Nela se vê a redução de amplitude de oscilação a $\frac{1}{9}$ em comparação com o exemplo anterior devido ao aumento inversamente proporcional das intensidades dos campos. Dos pontos de retorno da oscilação são ejetados componentes do pacote eletrônico que mantêm-se fortemente localizados devidos ao forte acoplamento com a rede.

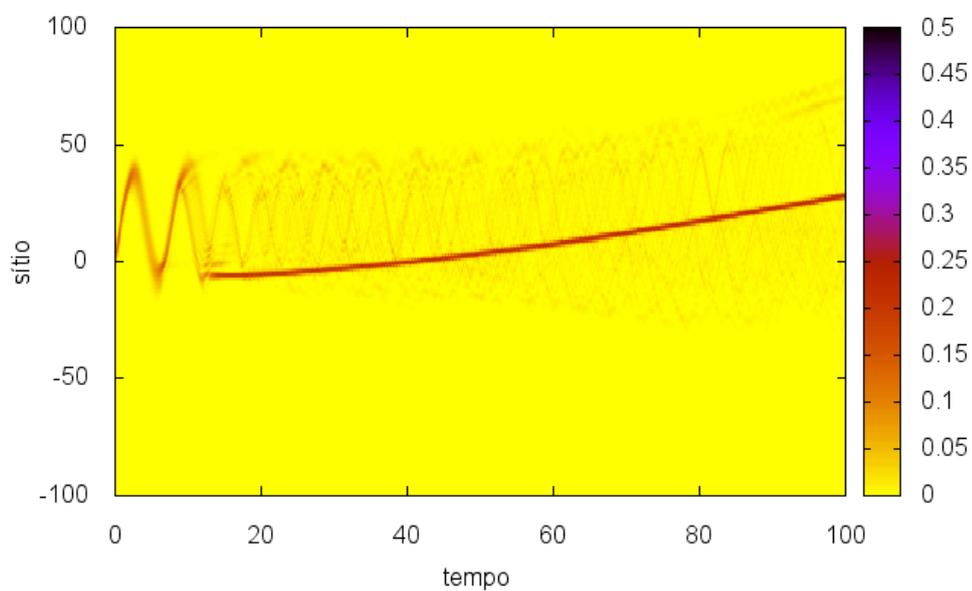


Figura 23 – Evolução do pacote de onda eletrônico para os parâmetros $\eta_E = 0.09$ e $\alpha = 2.0$.

A evolução do campo de deformação fonônica é mostrada na figura 24.

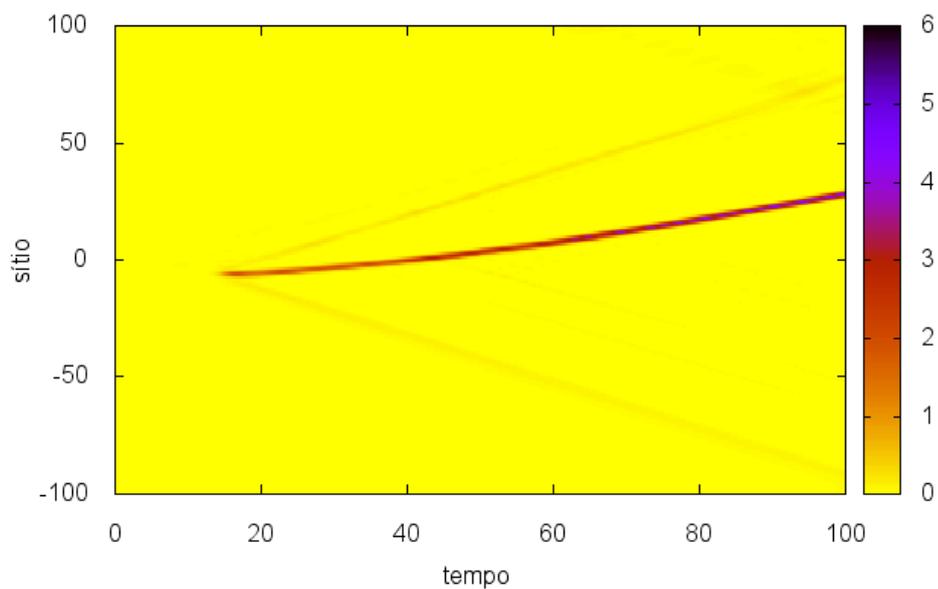


Figura 24 – Evolução do campo de deformação fonônica para os parâmetros $\eta_E = 0.09$ e $\alpha = 2.0$.

No ponto de retorno onde parte do pacote de onda foi ejetado três fônons foram formados: Um par de fônons menos intenso que, por não carregarem consigo partes do pacote eletrônico não são afetados pelo campo elétrico e propagaram simetricamente a partir de seu ponto de origem; e um fônon mais intenso que acompanhou a parte do pacote de onda que ali foi ejetado. A formação do pólaron nos pontos de retorno e sua evolução podem ser identificadas na figura 25.

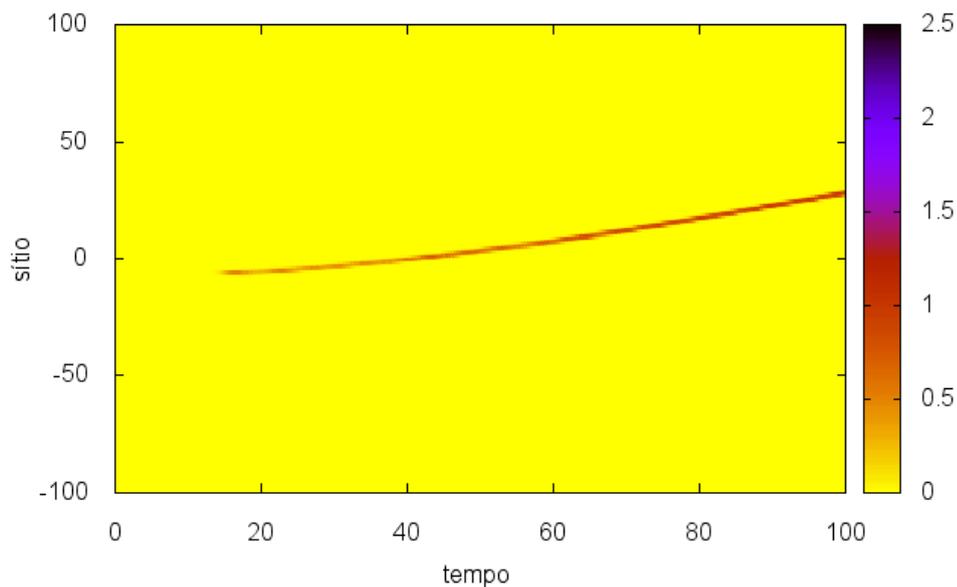


Figura 25 – Evolução do pólaron para os parâmetros: $\eta_E = 0.09$ e $\alpha = 2.0$.

A análise desta figura mostra que ao mover-se, o pólaron choca-se com a parte do pacote que manteve-se oscilando e dela componentes com frequência pouco expressiva são capturados, intensificando sua parcela eletrônica.

A figura 26 mostra a probabilidade de retorno e o desvio quadrático médio que apontam a difusão do elétron pela rede com o passar do tempo. Vemos ainda as participações eletrônicas e fonônicas que, neste caso, devido ao forte acoplamento do elétron com a rede, assume valores próximos, evidenciando a concentração da nuvem fonônica bem próximo à partícula.

Estes dois exemplos mostram que oscilações de Bloch são responsáveis pela formação de pólaron em seus pontos de retorno. A evolução temporal do pólaron depende tanto intensidade do campo elétrico quanto do vigor da interação elétron-fônon e, manipulando adequadamente estas variáveis, pode-se induzir diferentes comportamentos para a propagação do elétron na rede.

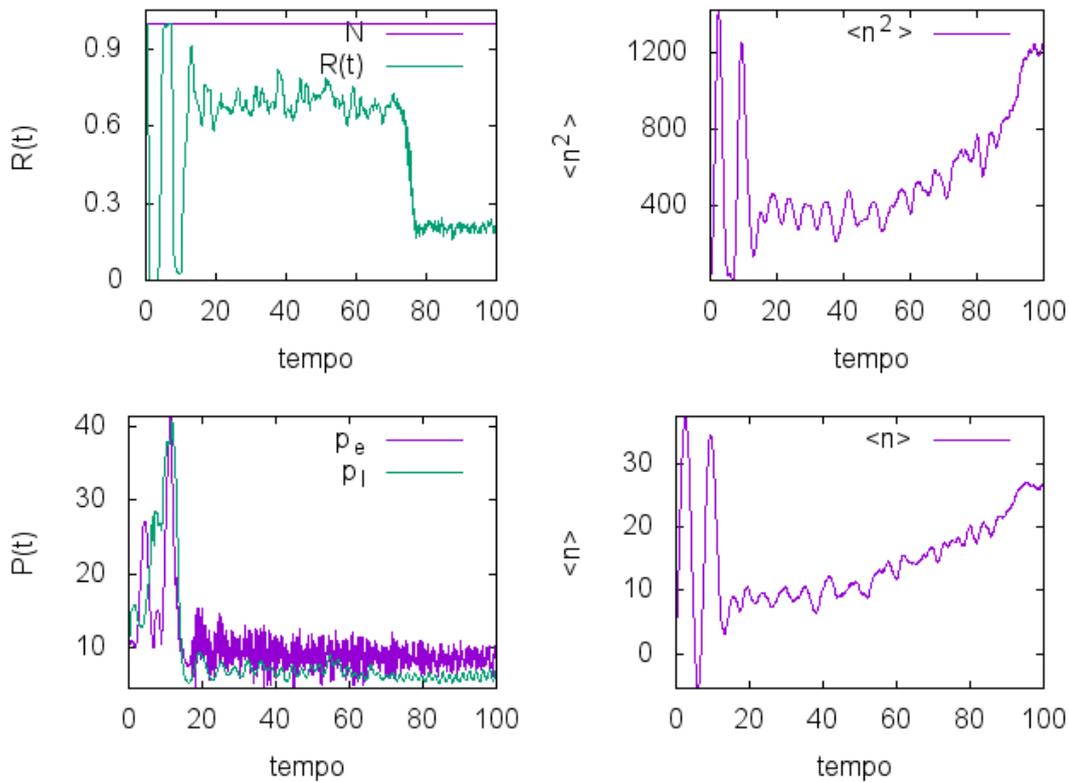


Figura 26 – Probabilidade de retorno $R(t)$, o desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$, funções participação eletrônica $P_e(t)$ e fonônica $P_l(t)$ e o centróide $\langle n \rangle$ para os parâmetros $\alpha = 2.0$, $\eta_E = 0.09$ e $\eta_F = 0.0$.

3.2.3 Interação elétron-fônon sob influência de campo elétrico AC

Como vimos, Existem diferenças entre os regimes oscilatórios induzidos por campos elétricos DC e AC.

Neste tópico investigaremos o processo de formação e evolução do pólaron regido por oscilações induzidas por campo AC e se as dissemelhanças ao comportamento oscilatório induzido por campo DC influencia tal processo. Para tanto, serão analisados dois casos: No primeiro a análise foi feita considerando os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = \frac{0.02405}{0.01} = 2.405$ e $\alpha = 1.0$; No segundo caso analisado consideramos os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = \frac{0.05520}{0.01} = 5.520$ e interação elétron-fônon $\alpha = 2.0$.

A figura 27 mostra que parte do pacote mantém-se localizada na origem enquanto outra parte executa o movimento oscilatório. Após um período de oscilação a parte do pacote localizada na origem se sobrepõe ao ponto de inflexão no qual a parte oscilante concentra-se em uma região ínfima. Neste momento outra parcela da parte oscilante adere à parte localizada na origem, a parte oscilante perde coesão e sua amplitude de oscilação aumenta.

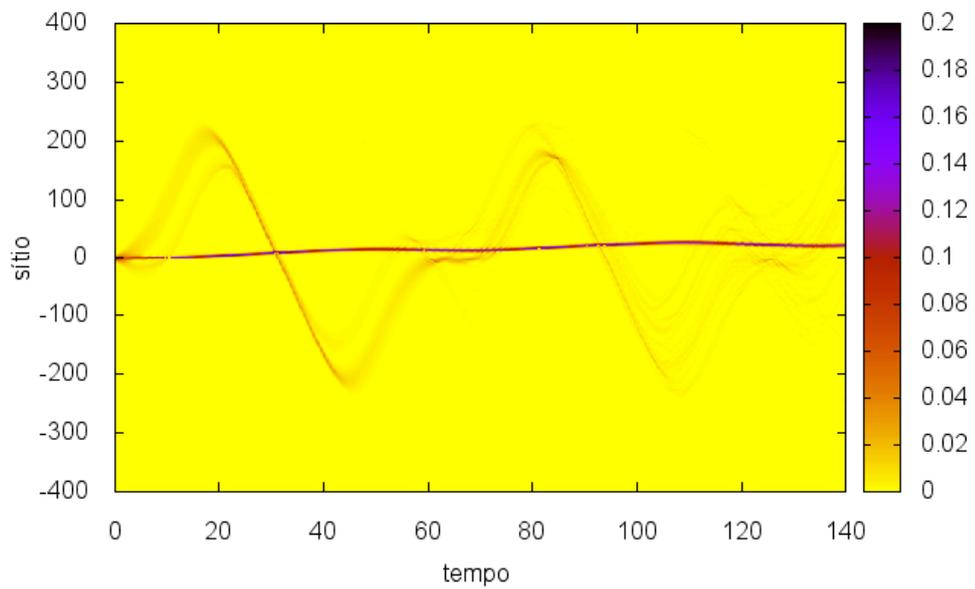


Figura 27 – Evolução temporal do pacote de onda eletrônico para os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = 2.405$ e $\alpha = 1.0$.

A figura 28 mostra que pares de linhas de fónons são criados nos pontos de

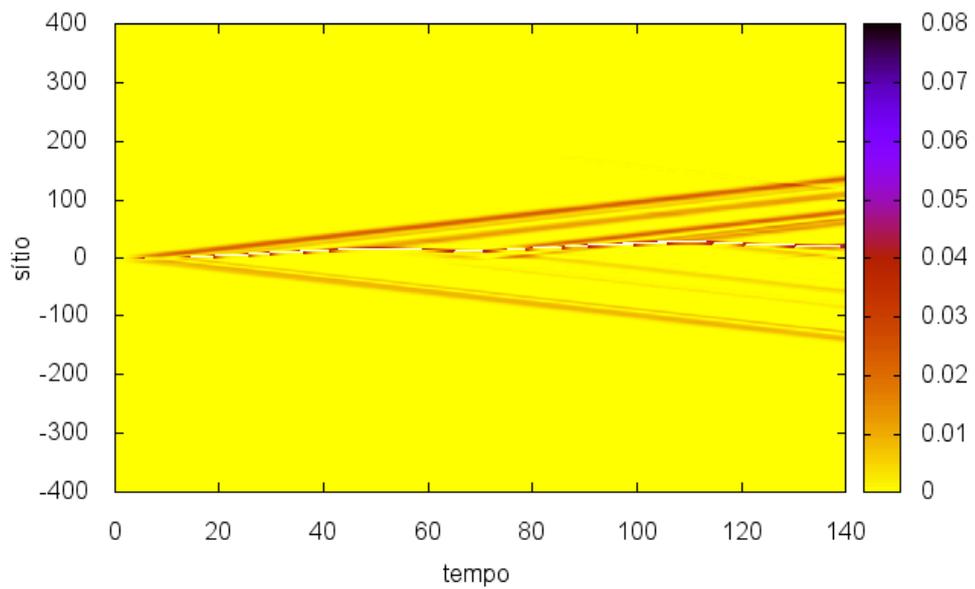


Figura 28 – Evolução do temporal do campo de deformação fonônica para os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = 2.405$ e $\alpha = 1.0$.

inflexão e nos pontos de retorno, sendo que os criados nos pontos de inflexões são bem mais intensos. Na origem três fónons são criados, um par que se propaga simetricamente e um terceiro que mantém-se ali localizado.

A figura 29 motra a evolução temporal do pólaron. Uma linha de pólaron se forma na origem e alé se mantém localizada. Um fenômeno mais curioso pode ser observado a partir da análise simultânea desta e da figura 28: Os fónons que se propagam simetricamente a partir da origem inicialmente não dão origem a pólarons porém, ao se deslocarem pela rede colidem com a parte do pacote de onda eletrônico que se mantém oscilando e estes choques choque dão origem a linhas de pólarons são formados e seguem a trajetória anteriormente percorrida pelo fónon.

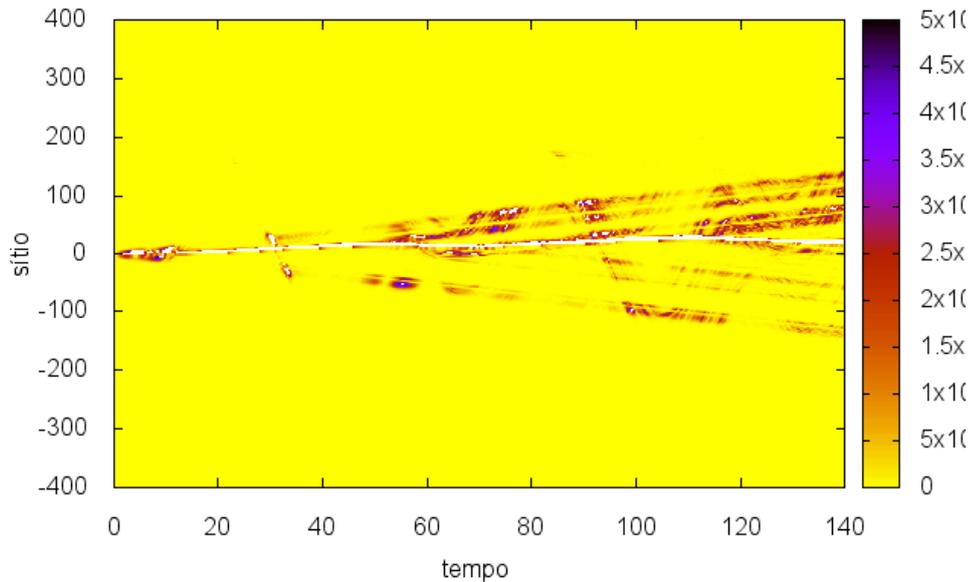


Figura 29 – Evolução do temporal do pólaron para os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = 2.405$ e $\alpha = 1.0$.

A probabilidade de retorno e a desvio quadrático médio na figura 30 indicam que está ocorrendo a difusão do elétron pela rede. A participação fonônica e o centróide oscilam sofrendo encrementos em sua amplitude a cada período. O pico pronunciado na probabilidade de retorno e a abrupta redução seguida de rápida recuperação dos valores da participação eletrônica identificam o instante em que os fónons preexistentes deram origem a pólarons. Estas mudanças mostram ainda que a formação do pólaron provocam momentâneos mas intensos distúrbios no pacote eletrônico.

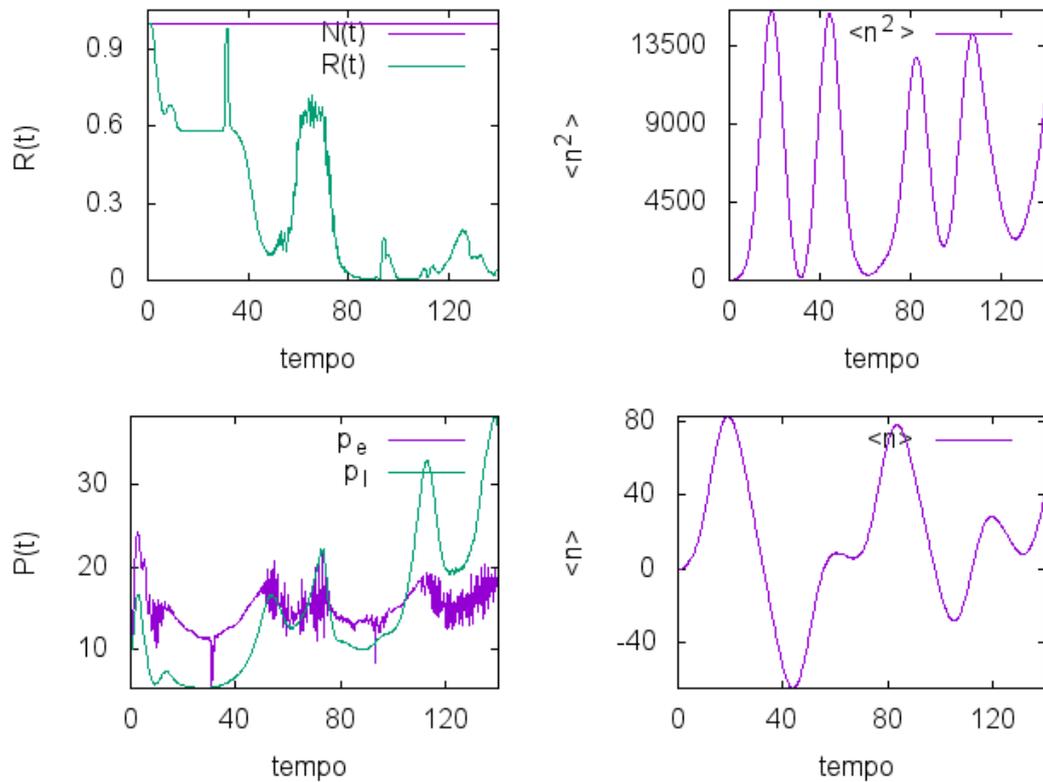


Figura 30 – Probabilidade de retorno $R(t)$, o desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$, funções participação eletrônica $P_e(t)$ e fonônica $P_l(t)$ e o centróide $\langle n \rangle$ para os parâmetros $\alpha = 1.0$, $K = 0.0$, $\eta_E = 0.0$, $\eta_F = 0.02405$ e $\omega = 0.01$.

O segundo caso analisado confirmou a ocorrência de formação de pólarons a partir do choque entre fônons preexistentes e o pacote de onda eletrônica. Além disso, revelou a existência do fenômeno oposto: a dissociação do pólaron resultante de sua colisão com o pacote de onda.

A figura 31 mostra o pacote de onda eletrônico dividindo em três partes na origem. Uma das partes permaneceu ali localizada; a segunda iniciou um movimento oscilatório acima da origem e a terceira propagou-se em sentido negativo. Simultaneamente linhas intensas e simétricas de fônons partem da origem e uma perturbação não tão intensa fica ali localizada, como mostrado na figura 32.

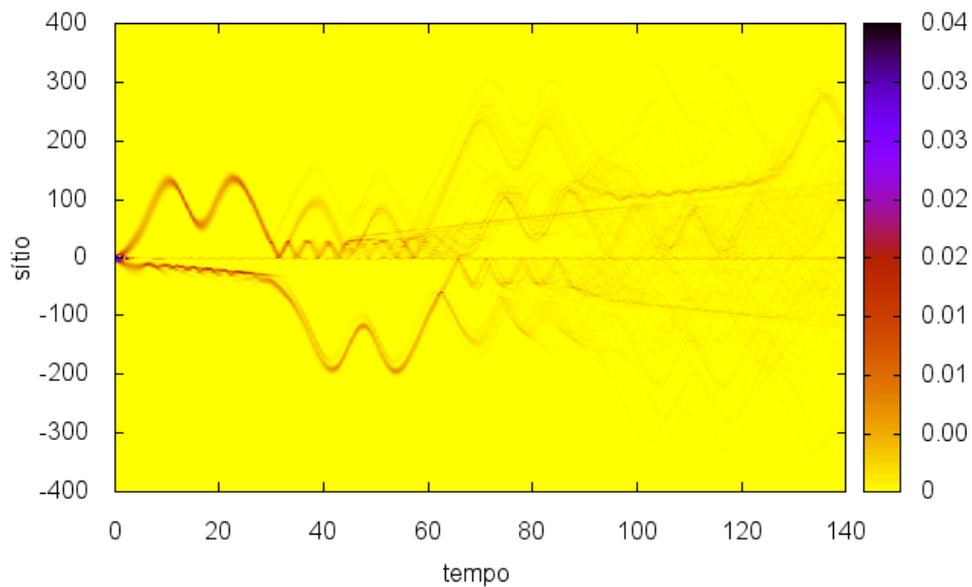


Figura 31 – Evolução do temporal do elétron para os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.520$ e $\alpha = 1.0$.

A linha de fônon que toma a direção positiva carrega consigo uma componente de frequência pouco expressiva do pacote de onda eletrônica. ao chocar-se com parte do pacote oscilante, dele captura sua componente de frequência dominante, intensificando a tênue linha de pólaron preexistente e possibilitando a manifestação das componentes com outras frequências. A linha de fônon que segue a direção negativa ao surgir captura uma parte mais significativa do pacote eletrônico que a citada anteriormente, dando origem a um pólaron mais intenso e, em certa posição da sua trajetória, o pólaron formado na origem se dissocia e sua componente eletrônica inicia movimento oscilatório. Ao chocar-se novamente com esta parte oscilante, o fônon oriundo da dissociação do pólaron interage com a componente de frequência dominante da parte do pacote, dando origem a outro pólaron. Este processo de dissociação e formação se repete mais uma vez antes do pólaron seguir seu caminho. Isto pode ser visto na figura 33.

Na figura 34 o desvio quadrático médio caracteriza a difusão do elétron pela rede e o centróide mostra que este espalhamento ocorre de maneira mais desordenada que nos exemplos anteriores. Picos na probabilidade de retorno evidenciam os distúrbios que as primeiras dissociações e formações do pólaron provocam no pacote de onda.

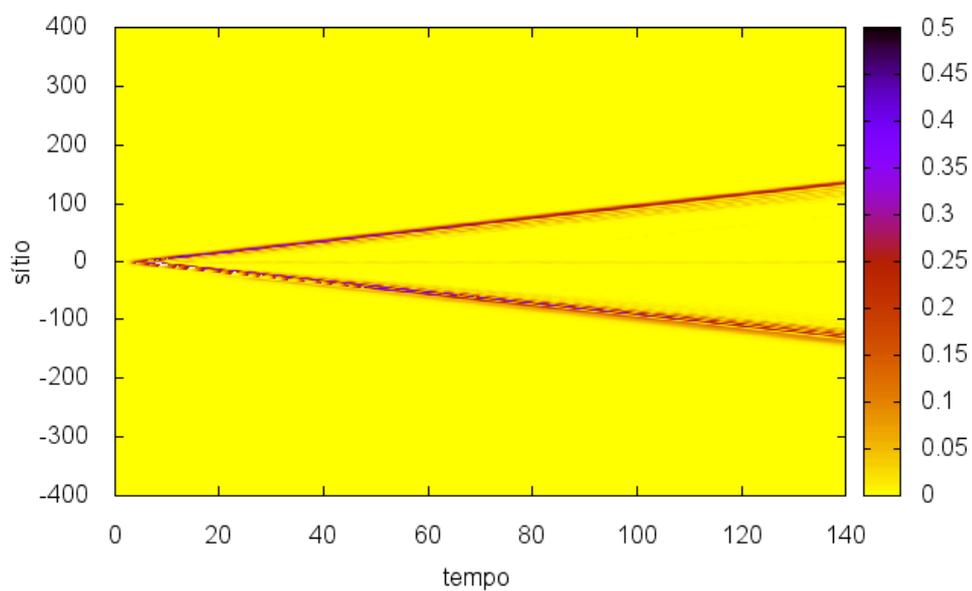


Figura 32 – Evolução do temporal do campo de deformação fonônica para os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.520$ e $\alpha = 2.0$.

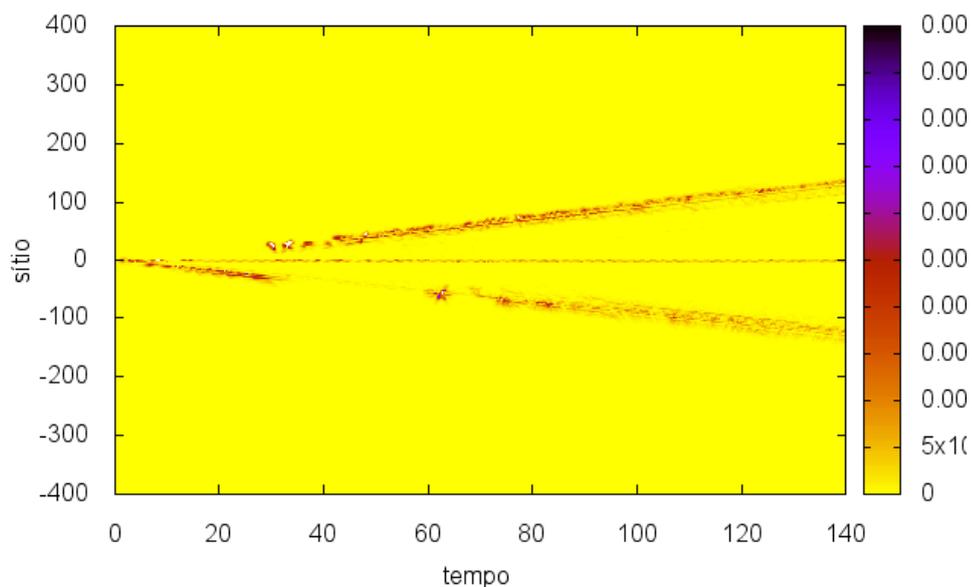


Figura 33 – Evolução do temporal do pólaron para os parâmetros $\frac{\omega_F}{\omega} = 5.520$ e $\alpha = 2.0$.

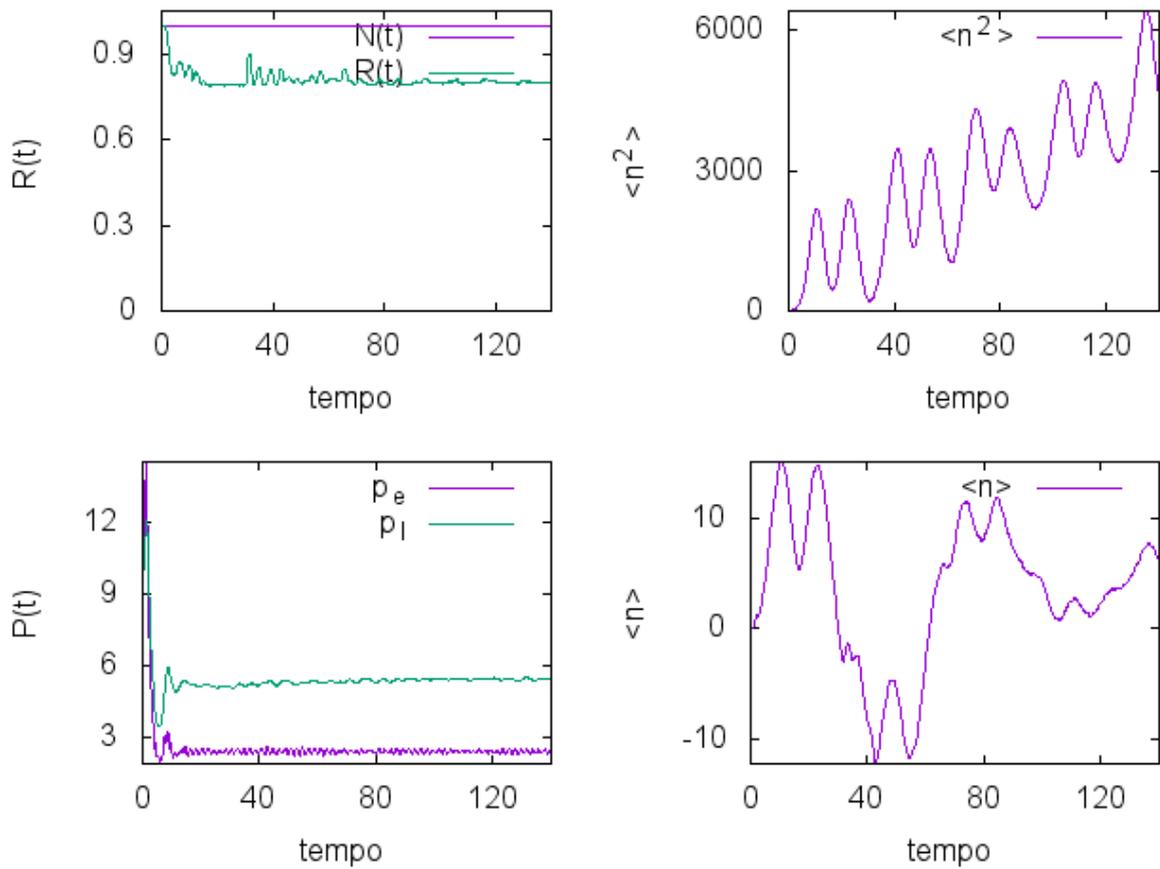


Figura 34 – Evolução da energia para: a probabilidade de retorno $R(t)$, o desvio quadrático médio $\langle n^2 \rangle$, funções participação eletrônica $P_e(t)$ e fonônica $\langle n \rangle$, e centróide $\langle n \rangle$ para os parâmetros $\alpha = 2.0$, $\varphi = 0.0$, $\eta_E = 0.0$, $\eta_F = 0.05520$ e $\omega = 0.01$.

Conclusão

Neste trabalho foi estudado por meio de simulação computacional a dinâmica de um elétron em um cristal unidimensional sob influência de campo elétrico DC/AC levando em conta a interação elétron-fônon. Para tanto, o elétron foi tratado quanticamente e sua função de onda modelada pela aproximação Tight-Binding; Por executarem apenas pequenas digressões em torno de sua posição de equilíbrio, os íons da rede foram tratados classicamente, de modo que a rede como um todo pôde ser vista como um conjunto de osciladores harmônicos acoplados. O estudo foi feito a partir da resolução numérica das equações de movimento utilizando o método de Runge-Kutta de 4^o ordem e a implementação computacional desta resolução foi feita utilizando a linguagem de programação C em sistema operacional linux.

A análise dos resultados obtidos sem levar em conta a interação elétron-fônon retomou as amplamente conhecidas oscilações de Bloch e localização dinâmica.

Ao analisar o comportamento do elétron livre da influência de campos elétricos mas interagindo com a rede, foi observado que a maior parte do pacote eletrônico manteve-se imóvel e uma pequena fração espalhou-se pela rede e, este aprisionamento do elétron demonstrou que a interação elétron-fônon age como uma armadilha para a partícula.

Quando o campo elétrico DC se faz presente, o pacote oscilante ejeta componentes em seus pontos de retorno e estes são acompanhados por vibrações da rede. Este é o processo de formação do pólaron.

Na presença de campo elétrico oscilante, pólarons são formados nos pontos de inflexão do movimento oscilatório do pacote de onda e, ao se chocarem com a parte remanescente do pacote, ocorrem intensas trocas de energia elétrica entre o pólaron e o pacote, de modo que um pólaron inicialmente formado se dissocia ao se chocar com o pacote e se refaz em um choque subsequente. Há indícios de que este processo de formação e destruição se repete enquanto o pólaron estiver na região onde o pacote de onda oscila.

Referências

- [1] C. H. Cícero, "Interação elétron-fônon em cadeia cristalina," December 2014.
- [2] C. Kittel, *Introdução à Física de Estado Sólido*. Livro Técnico e Científico, 8 ed., 1978.
- [3] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Cengage, 8 ed., 1976.
- [4] M. P. Marder, *Condensed Matter Physics*. Wiley, 2 ed., 2010.
- [5] M. Born, "Reminiscences of my work on the dynamics of crystal lattices," in *in Lattice Dynamics* (R. Wallis, ed.), pp. 1–8, Pergamon, Oxford, 1965.
- [6] L. Landau and S. Pekar, "Effective mass of a polaron," *Ukr. J. Phys.*, vol. 53, p. 71, Aug 2008.
- [7] D. H. Dunlap and V. M. Kenkre, "Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field," *Phys. Rev. B*, vol. 34, p. 3625, may 1986.
- [8] H. N. Nazareno, C. A. A. da Silva, and P. E. de Brito, "Dynamic localization in one-dimensional crystal with an impurity under the action of an electric field," *Phys. Rev. B*, vol. 50, p. 4503, Aug 1994.
- [9] C. C. Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics*. Wiley, 1977.
- [10] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. p. Flannery, *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2 ed., 1992.
- [11] F. F. Campos, filho, *Algoritmos Numéricos*. Livro Técnico e Científico, 2 ed., 2007.
- [12] H. N. Nazareno and P. E. de Brito, *Dynamic of electrons in low dimensional systems*. Aracne, Editrice, Roma, 2015.
- [13] H. N. Nazareno and G. J. C., "Bloch oscillations of an electron in a crystal under the action of an electric field," *Phys. stat.sil.*, vol. 153, p. 00, 1989.
- [14] H. S. Nguyen and H. N. Nazareno, "On the dynamic localization in 1d tight-binding systems," *Phys. Condens. Matter*, vol. 4, p. 00, Oct 1992.
- [15] H. N. Nazareno and P. E. de Brito, "Bloch oscillations as generators of polarons in 1d crystal," *Phys. Rev. B*, vol. 50494, April 2016.
- [16] W. S. M. Capone and M. Grilli, "Small-polaron formation and optical absorption in su-shrieffer-heeger and holstein model," *Phys. Rev. B*, vol. 56, p. 4484, June 1997.

-
- [17] E. D. C. Herrera-Gómez and F. Dominguez-Adame, "Super bloch oscillations in the peyrard-bishop-holstein model," *Physics letters A*, vol. 376, pp. 555–558, November 2011.

Apêndices

APÊNDICE A – Algoritmo

apêndice será exposto o algoritmo que permite calcular as amplitudes de Wannier, as posições e velocidades de cada sítio e as medidas auxiliares utilizadas para identificar localizações dinâmicas e formação de pólarons.

Algoritmo 1: Algoritmo Básico

Entrada:

Pacote inicial: x_0, σ e k

Tamanho da rede: N ($N = 2 \times L + 1$, L sítios para esquerda, L sítios para a direita)

Energia de cada sítio: ϵ_0

Tempo de simulação: t_f

Saída:

Arquivo 1: $t, n, a_n, b_n, u_n, v_n, u_{n+1} - u_{n-1}$

Arquivo 2: $t, N, \langle n \rangle, \langle n^2 \rangle, P_e, P_l, E_e, E_l$

```

1 início
2   Subrotina: Construção do Estado Inicial
3   para  $t \leftarrow 0$  a  $t_f$  faça
4     Subrotina: Cálculo do Estado
5     Subrotina: Medida das Grandezas

```

Algoritmo 2: Subrotina: Construção do Estado Inicial

Entrada: x_0, σ e k

Saída: Estado Inicial: $|\psi(0)\rangle$

```

1 início
2    $A \leftarrow 0$ 
3   para  $n \leftarrow -L$  a  $L$  faça
4      $A \leftarrow A + e^{-(n-x_0)^2/(\sigma^2)}$  (Normalização)
5   para  $n \leftarrow -L$  a  $L$  faça
6      $a_n \leftarrow e^{-(n-x_0)^2/(2\sigma^2)} \cos(\pi k \cdot x) / \sqrt{A}$ 
7      $b_n \leftarrow e^{-(n-x_0)^2/(2\sigma^2)} \sin(\pi k \cdot x) / \sqrt{A}$ 
8      $u_n \leftarrow 0$ 
9      $v_n \leftarrow 0$ 
10    (Fator 1/2 no expoente é devido a ser a raiz do  $|C_{0_n}|^2$ )

```

Algoritmo 3: Subrotina: Cálculo do estado $|\psi(t)\rangle$

Entrada: Estado No Instante anterior: $u_n(t-1), v_n(t-1), a_n(t-1), b_n(t-1)$
(com $\frac{-N+1}{2} < n < \frac{N-1}{2}$)

passo dt , $rt = \text{tempofonnico}/\text{tempoeletrnico}$,

$ra = \text{deslocamentofonnico}/\text{deslocamentoeletrnico}$

Saída: Estado Atual: $u_n(t), v_n(t), a_n(t), b_n(t)$ (com $\frac{-N+1}{2} < n < \frac{N-1}{2}$)

Arquivo 2: Probabilidade em cada tempo nos sítios.

1 **início**

2 Registra Arquivo 2: $t, n, |C_n|^2$

3 $t \leftarrow i * dt$

4 Subrotina: Primeiro passo Runge-Kutta

5 Subrotina: segundo passo Runge-Kutta

6 Subrotina: Terceiro passo Runge-Kutta

7 Subrotina: Quarto passo Runge-Kutta

8 **para** $n \leftarrow -L$ **a** L **faça**

9 $a_n \leftarrow a_n + \frac{h}{6}(rk_{1n} + 2rk_{2n} + 2rk_{3n} + rk_{4n})$

10 $b_n \leftarrow b_n + \frac{h}{6}(ik_{1n} + 2ik_{2n} + 2ik_{3n} + ik_{4n})$

11 $v_n \leftarrow v_n + \frac{h}{6}(vk_{1n} + 2vk_{2n} + 2vk_{3n} + vk_{4n})$

12 $u_n \leftarrow u_n + \frac{h}{6}(uk_{1n} + 2uk_{2n} + 2uk_{3n} + uk_{4n})$

13 Probabilidade: $(|C_n|^2) \leftarrow (a_n)^2 + (b_n)^2$

14 Registra Arquivo 1: $t, n, a_n, b_n, u_n, v_n, u_{n+1} - u_{n-1}$

Algoritmo 4: Subrotina: Primeiro passo Runge-Kutta

Entrada: Estado Anterior: $u_n(t-1), v_n(t-1), a_n(t-1), b_n(t-1)$ (com $\frac{-N+1}{2} < n < \frac{N-1}{2}$)

passo = dt , $rt = \text{tempofonnico}/\text{tempoeletrnico}$,

$ra = \text{deslocamentofonnico}/\text{deslocamentoeletrnico}$

Saída: $rk1, ik1, uk1, vk1$

1 **início**

2 **para** $n \leftarrow -L$ **a** L **faça**

3 $ik1_n \leftarrow -dt \times rt \times [-[\epsilon - ean(\eta_E + \eta_{Fsen}(\omega \times rt \times t)) + \alpha(u_{n+1} + u_{n-1})]a_n - w(a_{n-1} + a_{n+1})]$

4 $rk1_n \leftarrow dt \times rt \times [[\epsilon - ean(\eta_E + \eta_{Fsen}(\omega \times rt \times t))] \times b_n - w(b_{n-1} + b_{n+1})]$

5 $vk1_n \leftarrow dt \times [k(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n) + \alpha((a_{n+1}^2 + b_{n+1}^2) + (a_{n-1}^2 + b_{n-1}^2)) - ra(\eta_E + \eta_{Fcos}(\omega \times rt \times t))((a_{n+1}^2 + b_{n+1}^2) + (a_{n-1}^2 + b_{n-1}^2))]$

6 $uk1_n \leftarrow dt \times v_n$

Algoritmo 5: Subrotina: Segundo passo Runge-Kutta

Entrada: Estado Anterior: $u_n(t-1), v_n(t-1), a_n(t-1), b_n(t-1)$ (com $\frac{-N+1}{2} < n < \frac{N-1}{2}$)

$passo = dt, rt = \text{tempofonnico}/\text{tempoeletrnico},$

$ra = \text{deslocamentofonnico}/\text{deslocamentoeletrnico}$

$rk1, ik1, uk1, vk1$

Saída: $rk2, ik2, uk2, vk2$

1 **início**

2 **para** $n \leftarrow -L$ **a** L **faça**

3 $rk2_n \leftarrow dt \times rt \times [[\epsilon - n(\eta_E + \eta_F \sin(\omega \times rt \times t))] \times (b_n + \frac{1}{2} ik1_n) -$
 $w((b_{n-1} + \frac{1}{2} ik1_{n-1}) + (b_{n+1} + \frac{1}{2} ik1_{n+1}))]$

4 $ik2_n \leftarrow -dt \times rt \times [[\epsilon - n(\eta_E + \eta_F \sin(\omega \times rt \times t))] \times (a_n + \frac{1}{2} rk1_n) +$
 $\alpha(a_{n-1} + a_{n+1} + \frac{1}{2} rk2_{n-1} + \frac{1}{2} rk2_{n+1})$

5 $vk2_n \leftarrow dt \times [k((u_{n-1} + \frac{1}{2} uk1_{n-1}) + (u_{n+1} + \frac{1}{2} uk1_{n+1}) - 2(u_n + \frac{1}{2} uk1_n)) +$
 $\alpha(((a_{n+1} + \frac{1}{2} rk1_{n+1})^2 + (b_{n+1} + \frac{1}{2} ik1_{n+1})^2) + ((a_{n-1} + \frac{1}{2} rk1_{n-1})^2 + (b_{n-1} +$
 $\frac{1}{2} ik1_{n-1})^2)) - ra(\eta_E + \eta_F \cos(\omega \times rt \times t) \times ((a_n + \frac{1}{2} rk1_n)^2 + (b_n + \frac{1}{2} ik1_n)^2)]$

6 $uk2_n \leftarrow dt \times (v_n + \frac{1}{2} vk1_n)$

Algoritmo 6: Subrotina: Terceiro passo Runge-Kutta

Entrada: Estado Anterior: $u_n(t-1), v_n(t-1), a_n(t-1), b_n(t-1)$ (com $\frac{-N+1}{2} < n < \frac{N-1}{2}$)

$passo = dt, rt = \text{tempofonnico}/\text{tempoeletrnico},$

$ra = \text{deslocamentofonnico}/\text{deslocamentoeletrnico}$

$rk2, ik2, uk2, vk2$

Saída: $rk3, ik3, uk3, vk3$

1 **início**

2 **para** $n \leftarrow -L$ **a** L **faça**

3 $rk3_n \leftarrow dt \times rt \times [[\epsilon - n(\eta_E + \eta_F \sin(\omega \times rt \times t))] \times (b_n + \frac{1}{2} ik2_n) -$
 $w((b_{n-1} + \frac{1}{2} ik2_{n-1}) + (b_{n+1} + \frac{1}{2} ik2_{n+1}))]$

4 $ik3_n \leftarrow dt \times rt \times [-[\epsilon - n(\eta_E + \eta_F \sin(\omega \times rt \times t))] \times (a_n + \frac{1}{2} rk2_n) +$
 $\alpha(a_{n-1} + a_{n+1} + \frac{1}{2} rk2_{n-1} + \frac{1}{2} rk2_{n+1})$

5 $vk3_n \leftarrow dt \times [k((u_{n-1} + \frac{1}{2} uk2_{n-1}) + (u_{n+1} + \frac{1}{2} uk2_{n+1}) - 2(u_n + \frac{1}{2} uk2_n)) +$
 $\alpha(((a_{n+1} + \frac{1}{2} rk2_{n+1})^2 + (b_{n+1} + \frac{1}{2} ik2_{n+1})^2) + ((a_{n-1} + \frac{1}{2} rk2_{n-1})^2 + (b_{n-1} +$
 $\frac{1}{2} ik2_{n-1})^2)) - ra(\eta_E + \eta_F \cos(\omega \times rt \times t) \times ((a_n + \frac{1}{2} rk2_n)^2 + (b_n + \frac{1}{2} ik2_n)^2)]$

6 $uk3_n \leftarrow dt \times (v_n + \frac{1}{2} vk2_n)$

Algoritmo 7: Subrotina: Quarto passo Runge-Kutta

Entrada: Estado Anterior: $u_n(t-1), v_n(t-1), a_n(t-1), b_n(t-1)$ (com $\frac{-N+1}{2} < n < \frac{N-1}{2}$)

passo = dt, rt = tempofonico/tempoeletrnico,
ra = deslocamentofonico/deslocamentoeletrnico,
rk3, ik3, uk3, vk3

Saída: rk4, ik4, uk4, vk4

1 início

2 para $n \leftarrow -L$ a L faça

3 $rk4_n \leftarrow dt \times rt \times [[\epsilon - n(\eta_E + \eta_F \sin(\omega \times rt \times t))] \times (b_n + \frac{1}{2} ik2_n) -$
 $w((b_{n-1} + ik3_{n-1}) + (b_{n+1} + ik3_{n+1}))]$

4 $ik4_n \leftarrow dt \times rt \times [-[\epsilon - n(\eta_E + \eta_F \sin(\omega \times rt \times t))] \times (a_n + rk3_n) +$
 $\alpha(a_{n-1} + a_{n+1} + rk3_{n-1} + rk3_{n+1})]$

5 $vk4_n \leftarrow dt \times [k((u_{n-1} + uk3_{n-1}) + (u_{n+1} + uk3_{n+1}) - 2(u_n + uk2_n)) +$
 $\alpha(((a_{n+1} + rk3_{n+1})^2 + (b_{n+1} + ik3_{n+1})^2) + ((a_{n-1} + rk3_{n-1})^2 + (b_{n-1} +$
 $ik3_{n-1})^2)) - ra(\eta_E + \eta_F \cos(\omega \times rt \times t) \times ((a_n + rk3_n)^2 + (b_n + ik3_n)^2)]$

6 $uk4_n \leftarrow dt \times (v_n + vk3_n)$

Algoritmo 8: Subrotina: Medidas das grandezas

Entrada: Paracadastio : a_n, b_n, u_n, v_n .

$t, u_{n+1} - u_{n-1}$

Saída: Arquivo 2: Em cada passo: medidas de eletrônicas($N, \langle n \rangle, \langle n^2 \rangle,$
 $P_e(t), R(t)$ e E_e);

medidas fônicas($P_l(t)$);

1 início

2 $N \leftarrow 0$

3 $R \leftarrow 0$

4 $\langle n \rangle \leftarrow 0$

5 $\langle n^2 \rangle \leftarrow 0$

6 $P_e \leftarrow 0, P_l \leftarrow 0$

7 $E_{aux1} \leftarrow 0, E_{aux2} \leftarrow 0$

8 para $n \leftarrow -L$ a L faça

9 $|C_n|^2 \leftarrow (a_n)^2 + (b_n)^2$

10 $N \leftarrow Norma + |C_n|^2$

11 $\langle n \rangle \leftarrow Centro + n \times |C_n|^2$

12 $\langle n^2 \rangle \leftarrow MSD + n^2 \times |C_n|^2$

13 $P_e \leftarrow P_e + |C_n|^4$

14 $R \leftarrow R + |C_n|^2$

15 $E_{aux1} \leftarrow 0.5 * v_n^2 + 0.5(u_{n+1} - u_n)^2$

16 $E_{aux2} \leftarrow [0.5(v_n^2 + (u_{n+1} - u_n)^2)]^2$

17 $P_e \leftarrow 1/P_e$

18 $P_l \leftarrow E_{aux1}^2 / E_{aux2}$

19 Registra arquivo 3: $t, N, \langle n \rangle, \langle n^2 \rangle, Part_E, Part_l$