

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Desordem e Correlação Quântica em Duas Dimensões*

Artur de Souza Lima Malabarba

Trabalho de Conclusão de Curso, Bacharelado em Física

Orientação: Gerardo Guido Martinez Pino

Porto Alegre

2009/2

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

Sumário

1	Introdução	5
1.1	Motivação	5
1.2	A Equação Discreta, Não-Linearidade e Desordem	6
2	O Método Numérico	13
2.1	Ordem do Erro	14
2.2	Processamento de Dados	15
3	Resultados	19
3.1	Primeiro Caso	19
3.2	Segundo Caso	20
3.3	Terceiro Caso	22
4	Conclusão	26
	Referências Bibliográficas	29

1 Introdução

1.1 Motivação

Atualmente existe a possibilidade de se observar experimentalmente as propriedades de gases atômicos ultrafrios, na faixa dos nanokelvins (nK), em potenciais periódicos ou quase-periódicos, produzidos pela interferência de vários feixes de laser, chamados de redes ópticas ou também de cristais fotônicos [1-4]. Isto tem gerado uma série de trabalhos científicos, tanto teóricos como experimentais no último período. Estes estudos têm mudado a visão de aspectos fundamentais na mecânica quântica, em especial, das teorias de muitos corpos. Expansão de condensados de Bose-Einstein, respiradores discretos, modos localizados intrínsecos, sólitons discretos, feixes auto-focados (self-focusing), ondas de matéria, são algumas palavras chaves para estes novos comportamentos observados na matéria condensada em condições extremas, de temperaturas muito baixas.

A natureza provê estes sistemas com interações não-lineares resultantes das forças coulombianas entre as partículas carregadas, daí que estes sistemas quânticos são denominados de "fortemente correlacionados". Por outro lado, estes sistemas podem ser intrinsecamente desordenados, devido a impurezas, imperfeições na rede, vacâncias, ou como mencionado no parágrafo acima, estarem na presença de potenciais quase-periódicos. Nosso interesse está focado na descrição destes sistemas em condições de baixa dimensionalidade. Por isso que iniciamos este estudo da interação entre desordem e correlação quântica em duas dimensões.

A maneira que decidimos abordar este tema foi analisar numericamente a equação de Schrödinger Discreta Não-Linear (ESDNL) em duas dimensões, com um termo de desordem estático e determinístico descrito pelo modelo de Aubry-André [5]. A forma como foi realizado este estudo consistiu em caracterizar a evolução temporal de pacotes de onda inicialmente localizados no centro de uma rede finita discreta no plano x-y. Para isso desenvolvemos um programa em fortran 90 usando a técnica de Runge-Kutta de quarta ordem para integrar a equação ESDNL.

A nossa motivação específica reside na publicação de resultados recentes [6], que indicam

que haveria nestes sistemas perda da localização por não-linearidade, aspecto que motivou nossa curiosidade científica, por se tratar de um resultado anti-intuitivo. Tanto a correlação quântica (ou não-linearidade) quanto a desordem congelada induzem (separadamente) localização de pacotes de onda em função do tempo.

Nosso estudo permitiu verificar que em certas condições, ao deslocar o centro do potencial de Aubry-André no plano x-y, se produz perda da localização no sistema pela ação conjunta da desordem e da não-linearidade, o que corrobora os resultados da publicação [6] usando um modelo e condições diferentes, e os expande para uma variedade maior de situações. Esperamos que este resultado seja publicável por se tratar de um resultado novo.

1.2 A Equação Discreta, Não-Linearidade e Desordem

Este estudo busca, primeiramente, explorar o comportamento das soluções da versão bidimensional da equação de Shroedinger discreta não-linear com desordem (eq. 1.1). A equação está definida sobre uma rede discreta bidimensional de $(2N + 1) \times (2N + 1)$ sítios

$$i\hbar \frac{d\Psi_{i,j}}{dt} = -V(\Psi_{i+1,j} + \Psi_{i-1,j} + \Psi_{i,j+1} + \Psi_{i,j-1}) + U|\Psi_{i,j}|^2\Psi_{i,j} + \varepsilon_{i,j}\Psi_{i,j} \quad (1.1)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_K + \mathcal{H}_U + \mathcal{H}_\varepsilon \quad (1.2)$$

com $-N < i, j < N$.

Até o presente, a ESDNL já foi bastante estudada em sua versão unidimensional, e se tem ampla compreensão dos seus possíveis comportamentos e características. Para melhor explicá-los, analisamos o hamiltoniano (1.2) aos poucos, começando pelo primeiro termo.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_K = -V \sum_{p,q=-N}^N & |p,q\rangle \langle p-1,q| + |p,q\rangle \langle p,q-1| + \dots \\ & + |p,q\rangle \langle p+1,q| + |p,q\rangle \langle p,q+1| \end{aligned} \quad (1.3)$$

O hamiltoniano (1.3) é o único não-diagonal e, por isso, é o responsável pela parte cinética do sistema e aceita as ondas de Bessel como soluções [1]. As fig. 1.1 e 1.2 mostram bem este caráter. A primeira exhibe a densidade de probabilidade do elétron para três instantes de tempo diferentes. A segunda descreve a evolução temporal de um corte transversal da mesma densidade. Somente os sítios com $i = 0$ aparecem neste gráfico, de modo que o eixo x expressa o tempo (medido em número de passos de integração), e o eixo z expressa o módulo quadrado da função de onda para cada instante de tempo em cada um dos sítios $(0, j)$. Com apenas o sítio central ocupado como condição inicial, vemos que a função se espalha com facilidade. O

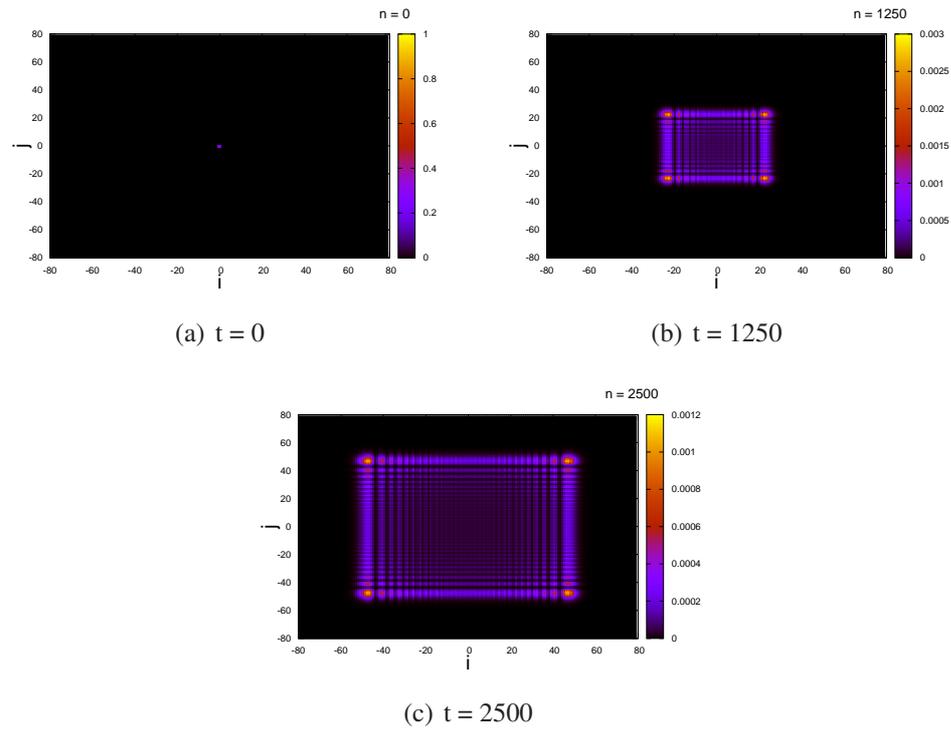


Figura 1.1: Espalhamento da densidade de probabilidade de um sistema com $U = 0$ e $\varepsilon = 0$ para três instantes de tempo (medidos em número de passos de integração).

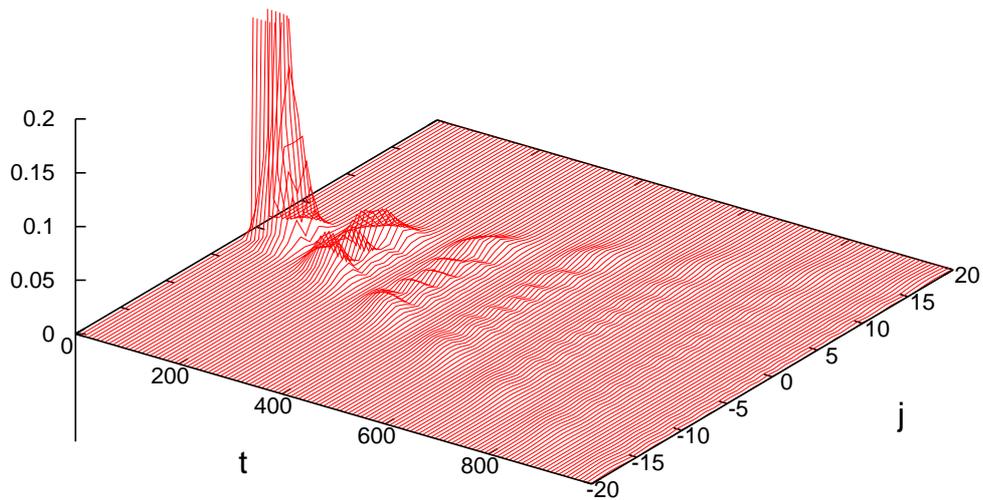


Figura 1.2: Evolução temporal de um corte transversal da função de onda para $U = 0$ e $\varepsilon = 0$.

coeficiente V é chamado de coeficiente de *hopping* e influencia as energias e a velocidade de espalhamento de excitações. Não há porque estudar o caso $V = 0$ já que se trata simplesmente de um conjunto de sítios não-interagentes e equações desacopladas. Por outro lado, também não é necessário estudar o comportamento da função de onda para vários valores de V , pois a substituição $t \rightarrow t/V$, $U \rightarrow UV$, $\varepsilon \rightarrow \varepsilon V$, faz com que a equação não envolva explicitamente o coeficiente de *hopping*, permitindo que nos concentremos apenas na influência que os coeficientes U e ε têm sobre a evolução temporal da função de onda, e é neles que jaz nosso interesse.

O segundo termo do hamiltoniano (eq. 1.4)

$$\mathcal{H}_U = U \sum_{p,q=-N}^N |\langle p,q|\Psi\rangle|^2 |p,q\rangle \langle p,q| \quad (1.4)$$

é o termo não-linear, pois depende explicitamente de $|\Psi\rangle$. O efeito físico deste termo é criar poços ou picos de energia nos sítios da rede onde o elétron tem mais probabilidade de ser encontrado. Essa propriedade se manifesta em redes que se deformam ou de outra forma interagem fortemente com o movimento de elétrons presentes e não é uma característica muito comum. No entanto, ela já é verificada em alguns compostos e moléculas orgânicas [7]. Como nota-se nas fig. 1.3 e 1.4, o resultado deste efeito é o de impedir o movimento do elétron sempre que a não-linearidade for intensa o bastante para vencer o fator cinético do hamiltoniano. Este efeito é essencialmente binário, pois um valor de U abaixo do valor crítico U_{crit} retarda muito fracamente o movimento do elétron, enquanto que um valor de U acima do valor crítico rapidamente localiza a função de onda, garantindo que quase toda função de onda permaneça nas proximidades do sítio inicial. A capacidade de permitir ou inibir a passagem de corrente, principalmente com um limiar tão abrupto, é sempre algo de interesse. Os efeitos da não-linearidade em sistemas quânticos receberam muita atenção na literatura, principalmente em uma dimensão. Parte do nosso objetivo é estudar com mais detalhes todos esses efeitos na presença de desordem e em duas dimensões.

Por último, o termo de desordem (1.5)

$$\mathcal{H}_\varepsilon = \sum_{p,q=-N}^N \varepsilon_{p,q} |p,q\rangle \langle p,q| \quad (1.5)$$

consiste em uma energia potencial constante no tempo, definida de modo que sua média seja zero, que seu valor em cada sítio tenha pouca correlação com os vizinhos, e que ela seja aperiódica na rede. Existem várias configurações possíveis para a desordem que satisfaçam essas condições, uma bastante comum na literatura é a desordem de Aubry-André [5], definida em uma dimensão por:

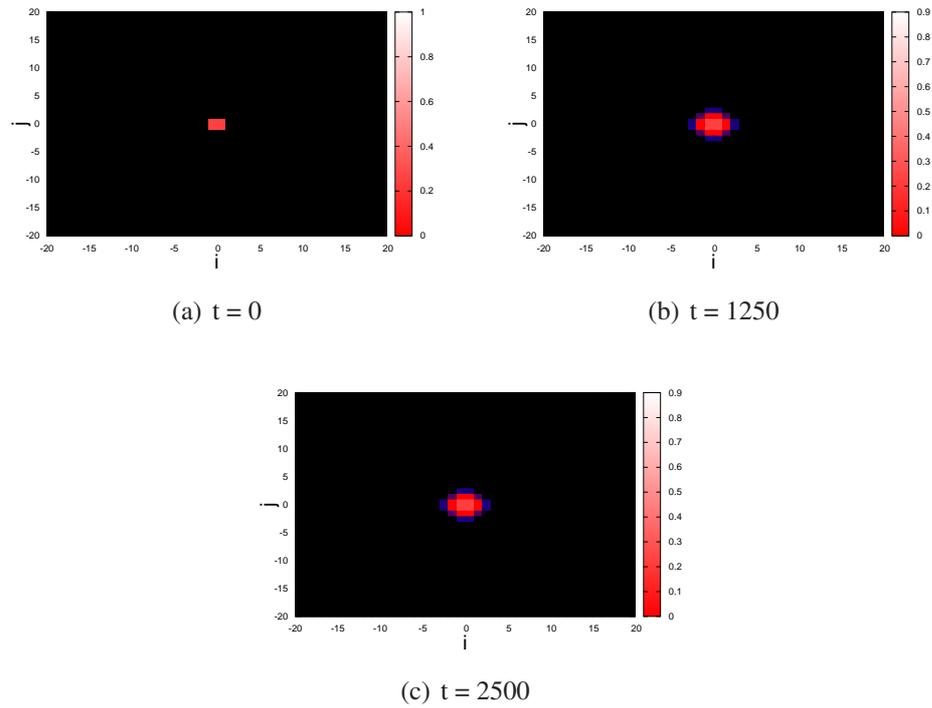


Figura 1.3: Densidade de probabilidade de um sistema com $U = 9$ e $\varepsilon = 0$ para três instantes de tempo (medidos em número de passos de integração).

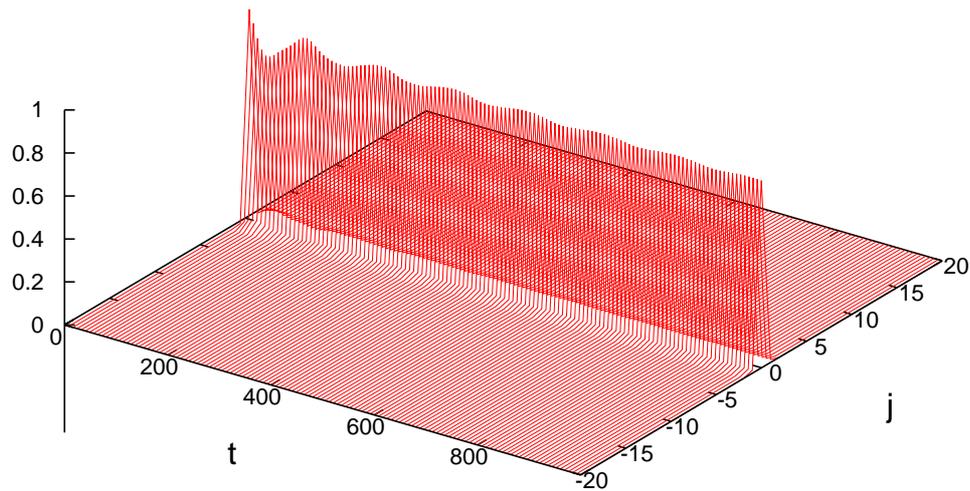


Figura 1.4: Evolução temporal de um corte transversal da função de onda para $U = 9$ e $\varepsilon = 0$.

$$\varepsilon_i = \varepsilon \cos(i\sigma\pi), \quad \sigma = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$$

Onde o fator σ , a razão áurea, é escolhido para que o cosseno não seja comensurado com a rede. Esta expressão pode ser estendida para duas dimensões de algumas formas, neste estudo foram abordadas as seguintes configurações

$$\varepsilon_{i,j} = \varepsilon [\cos(2\pi\sigma i) + \cos(2\pi\sigma j)] \quad (1.6)$$

$$\varepsilon_{i,j} = \varepsilon [\cos(2\pi\sigma i) - \cos(2\pi\sigma j)] \quad (1.7)$$

$$\varepsilon_{i,j} = -\varepsilon [\cos(2\pi\sigma i) + \cos(2\pi\sigma j)] \quad (1.8)$$

Já se tem conhecimento [3] que o comportamento da função de onda depende não só da forma do potencial, mas também do valor que este assume no sítio inicial (relativamente ao seu valor nos sítios vizinhos). As três configurações apresentadas nas equações (1.6), (1.7), e (1.8) apresentam, respectivamente, $\varepsilon_{0,0} = 2\varepsilon$, $\varepsilon_{0,0} = 0$, e $\varepsilon_{0,0} = -2\varepsilon$. Com isso, abordamos três situações diferenciadas: potencial máximo no sítio inicial, potencial no sítio inicial igual à média, e potencial mínimo no sítio inicial. As diferenças entre o comportamento gerado por cada caso serão melhor abordadas nos resultados, mas é importante compreender as diferenças básicas entre um sistema homogêneo e um desordenado.

Quando um elétron se desloca numa rede sua energia fica restrita as bandas de energia que variam de uma rede para a outra. Se estas bandas forem largas, ele se move quase como uma partícula livre. Como as bandas são provenientes da periodicidade da rede, quaisquer efeitos que quebrem essa periodicidade tornarão mais restrito e difícil o movimento do elétron, até o ponto em que ele não poderá mais se mover. Este é o papel da desordem (fig. 1.5 e 1.6). Aplicando uma energia potencial não periódica, a função de onda gradualmente se torna mais confinada. Ao contrário do efeito da não-linearidade, a localização por desordem é bem mais gradual, e é muito mais difícil encontrar um limiar de localização. Analiticamente, resultados mostram um limiar de $\varepsilon = 2$ para o caso linear unidimensional [8] (lembrando que ε representa, na verdade, ε/V). Também, comparando a figura 1.6 com a 1.4 nota-se outra clara distinção entre a localização por desordem e a localização por não-linearidade: a segunda amortece o efeito de respiração¹ da função de onda, enquanto a primeira preserva este efeito mas de uma forma irregular.

Isto resume o que se pode esperar de um sistema quântico discreto que apresente não-

¹O termo "respiração" é usado quando se tem um efeito de oscilação associado a uma área, ou volume.

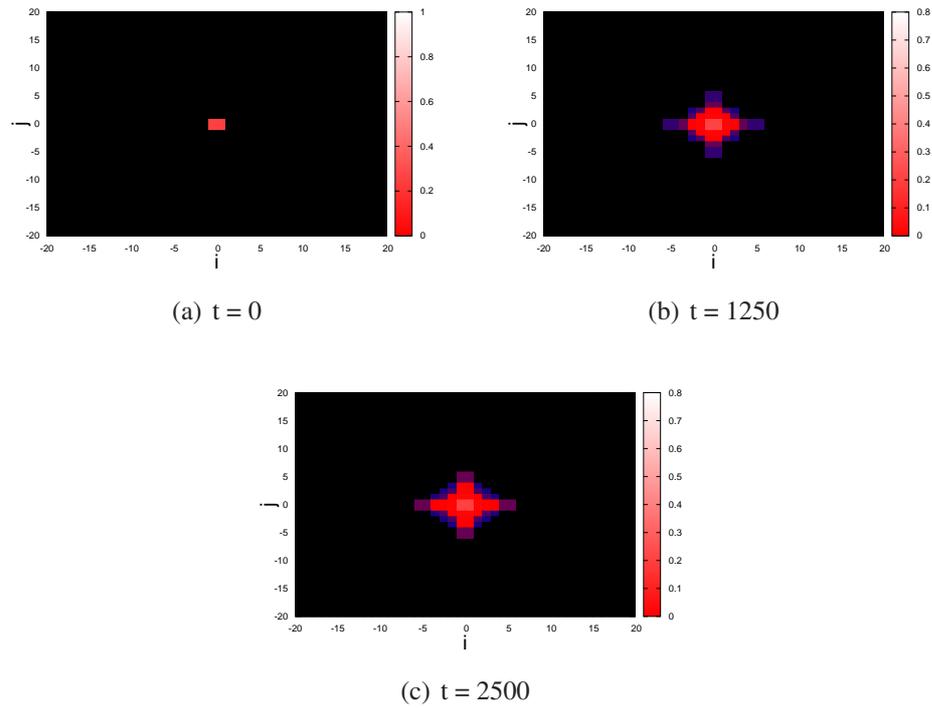


Figura 1.5: Densidade de probabilidade de um sistema com $U = 0$ e $\varepsilon = 3.4$ para três instantes de tempo (medidos em número de passos de integração).

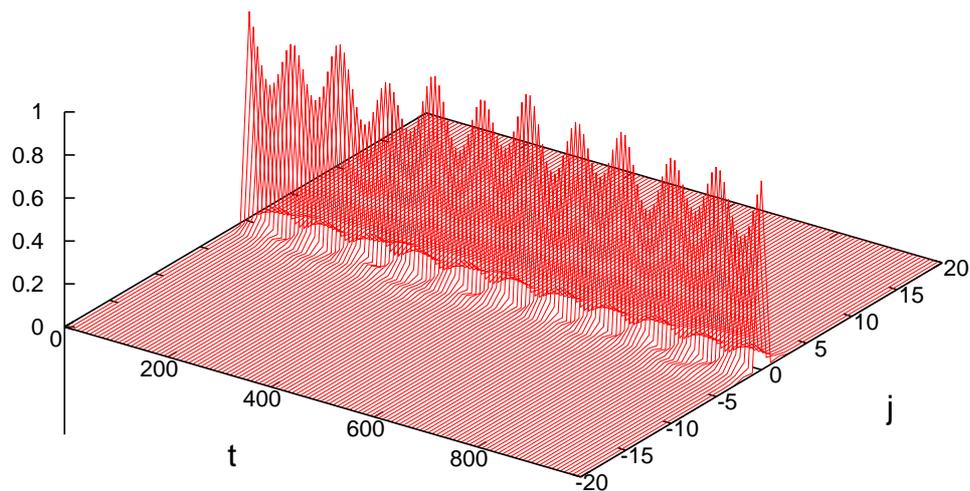


Figura 1.6: Evolução temporal de um corte transversal da função de onda para $U = 0$ e $\varepsilon = 3.4$.

linearidade ou desordem. No entanto, o nosso principal objetivo aqui não é o de estudar um destes sistemas (sistemas simples), mas sim o de explorar as propriedades de um sistema que apresente ambas propriedades (sistema misto). Em particular, nos interessamos por uma característica que é exclusiva do sistema misto: o efeito de deslocalização, também chamado de deslocalização induzida por desordem e de deslocalização induzida por não-linearidade. Este fenômeno tem aparecido recentemente na literatura em uma dimensão [6].

Nos sistemas simples, o aumento de U ou de ε , separadamente, sempre provoca um aumento na localização da função de onda, contudo, o aumento de U em uma rede já desordenada pode provocar exatamente o efeito contrário, i. e. a função de onda fica menos localizada do que estaria na ausência de não-linearidade. O mesmo ocorre na situação inversa, um sistema que já seria localizado pela desordem torna-se mais disperso na presença de não-linearidade. Nosso objetivo aqui é estudar este comportamento em duas dimensões abordando todas as possibilidades mencionadas acima (eqs. 1.6, 1.7, e 1.8).

2 O Método Numérico

Para solucionar a ESDNL foi utilizada uma rede de 501x501 sítios com condição de contorno nula ($\psi_{i,j}(t) = 0$ para $i, j = \pm 500$) e com uma delta de Kronecker centrada na origem como condição inicial ($\psi_{i,j}(0) = \delta_{i,0}\delta_{0,j}$). Inevitavelmente, discretizamos a variável independente, o que nos permite aplicar o método Runge-Kutta de quarta ordem [9], iterado por 8000 passos temporais, para integrar a equação de Schrödinger.

Definindo $\psi_{i,j}^n$ como o valor calculado para a função de onda no sítio (i, j) no enésimo passo, e Ψ^n como a matriz que expressa a função em toda a rede, queremos $f_{i,j}(t, \Psi^n) = \frac{d\psi_{i,j}^n}{dt}$. Que se resume a equação autônoma

$$f_{i,j}(\Psi^n) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(\Psi^n)\Psi^n$$

já que o hamiltoniano 1.1 não depende explicitamente do tempo. Definida a $f_{i,j}$, dado o estado do sistema Ψ^n a cada passo, e sendo h a metade do intervalo de tempo dt correspondente, uma iteração do método numérico se resume aos seguintes passos:

$$\begin{aligned}\alpha_{i,j}^1 &= f_{i,j}(\Psi^n) \\ \alpha_{i,j}^2 &= f_{i,j}(\Psi^n + h\mathbf{A}^1) \\ \alpha_{i,j}^3 &= f_{i,j}(\Psi^n + h\mathbf{A}^2) \\ \alpha_{i,j}^4 &= f_{i,j}(\Psi^n + 2h\mathbf{A}^3), \quad \mathbf{A}^p = [\alpha_{i,j}^p] \\ \psi_{i,j}^{n+1} &= \psi_{i,j}^n + \frac{h}{3}(\alpha_{i,j}^1 + 2\alpha_{i,j}^2 + 2\alpha_{i,j}^3 + \alpha_{i,j}^4)\end{aligned}\tag{2.1}$$

Os \mathbf{A}^p são matrizes NxN cujos elementos são os $\alpha_{i,j}^p$, de modo que elas expressam a taxa de variação da função de onda em toda a rede. A primeira das equações (2.1) calcula derivada temporal da função de onda no início do passo temporal. A segunda e a terceira equação calculam a derivada na metade do passo, cada uma usando a derivada obtida com a equação anterior. A

quarta equação repete o cálculo para o final do intervalo, e a última equação utiliza uma média ponderada das quatro derivadas como a taxa de variação para integração.

2.1 Ordem do Erro

O erro numérico associado ao algoritmo (2.1) é de quinta ordem em dt por iteração. Para mostrar isso basta expandir em séries de potências os termos presentes no último passo do algoritmo, e chegar a uma expressão idêntica até quarta ordem em dt à série de potências da própria função. Por simplicidade fazemos este cálculo para o caso de uma função real de uma variável.

Seja uma equação diferencial autônoma de primeira ordem definida por

$$\frac{dx}{dt} = g(x), \quad x = x(t)$$

Dado $x(t)$ para um instante específico, o algoritmo em questão estipula que o valor da função ao final de um passo de integração será

$$x_{rk4}(t + dt) = x(t) + \frac{dt}{6}(g^1 + 2g^2 + 2g^3 + g^4) \quad (2.2)$$

Com g^n definidos por

$$\begin{aligned} g^1 &= g(x) = g \\ g^2 &= g(x + hg^1) \\ &= g + hgg' + \frac{1}{2}h^2g^2g'' + \frac{1}{6}h^3g^3g''', \quad g' = \frac{dg}{dx} \\ g^3 &= g(x + hg^2) \\ &= g + hgg' + h^2 \left(gg'^2 + \frac{1}{2}g^2g'' \right) + h^3 \left(\frac{3}{2}g^2g'g'' + \frac{1}{6}g^3g''' \right) \\ g^4 &= g(x + 2hg^3) \\ &= g + 2hgg' + 2h^2(gg'^2 + g^2g'') + 4h^3 \left(\frac{5}{4}g^2g'g'' + \frac{1}{3}g^3g''' + \frac{1}{2}gg'^3 \right) \end{aligned}$$

Onde as expansões em série se restringem até terceira ordem em dt já que estes termos estão multiplicados por dt na equação (2.2). Substituindo todos os g^n , usando que $dt = 2h$, e agrupando os termos de mesma ordem:

$$x_{rk4}(t + dt) = x(t) + gdt + \frac{1}{2}gg'dt^2 + \frac{1}{6}(g^2g'' + gg'^2)dt^3 + \frac{1}{24}(4g^2g'g'' + g^3g''' + gg'^3)dt^4$$

Paralelamente, a série de potências da função em si é:

$$\begin{aligned}
 x(t + dt) &= x(t) + x'dt + \frac{1}{2}x''dt^2 + \frac{1}{6}x'''dt^3 + \frac{1}{24}x''''dt^4 + \dots \\
 x''(t) &= \frac{dg(x)}{dt} = g'g \\
 x'''(t) &= \frac{d^2g(x)}{dt^2} = g''g^2 + g'^2g \\
 x''''(t) &= \frac{d^3g(x)}{dt^3} = g'''g^3 + 4g''g'g^2 + g'^3g
 \end{aligned}$$

Juntando essas quatro equações, conclui-se imediatamente que a equação (2.2) é idêntica a uma expansão da função $x(t)$ até quarta ordem em dt . O que significa que o erro associado a cada passo deste algoritmo é de no mínimo quinta ordem.

2.2 Processamento de Dados

Pelo método descrito no início deste capítulo, a equação de Schrödinger é integrada e se obtém a função de onda do sistema em função do tempo. Com ela são calculados alguns parâmetros, adiante chamados de funções descritivas, que são obtidos a partir de Ψ e avaliam a localização da função a cada instante. Estes são:

Número de Participação de Wegner

$$\mathcal{W}(t) = \left[\sum_{i,j} |\psi_{i,j}(t)|^4 \right]^{-1}$$

Ele vale 1 se a função de onda está perfeitamente localizada em um sítio, seu valor tende ao número total de sítios quando a função de onda está se espalhando, e vale exatamente n quando se tem n sítios igualmente ocupados. Assim ele tem a vantagem de informar, de forma bem aproximada, quantos sítios a função de onda ocupa em dado instante de tempo.

Entropia de Shannon

$$\mathcal{S}(t) = - \sum_{i,j} |\psi_{i,j}(t)|^2 \ln |\psi_{i,j}(t)|^2$$

Como é logarítmica, tem a vantagem de não acentuar demais os casos espalhados, de modo a não ofuscar o comportamento dos casos localizados. Vale $\ln n$ quando se tem n sítios igualmente ocupados. Além disso, apresenta todas as propriedades conhecidas de uma entropia calculada sobre uma densidade de probabilidade.

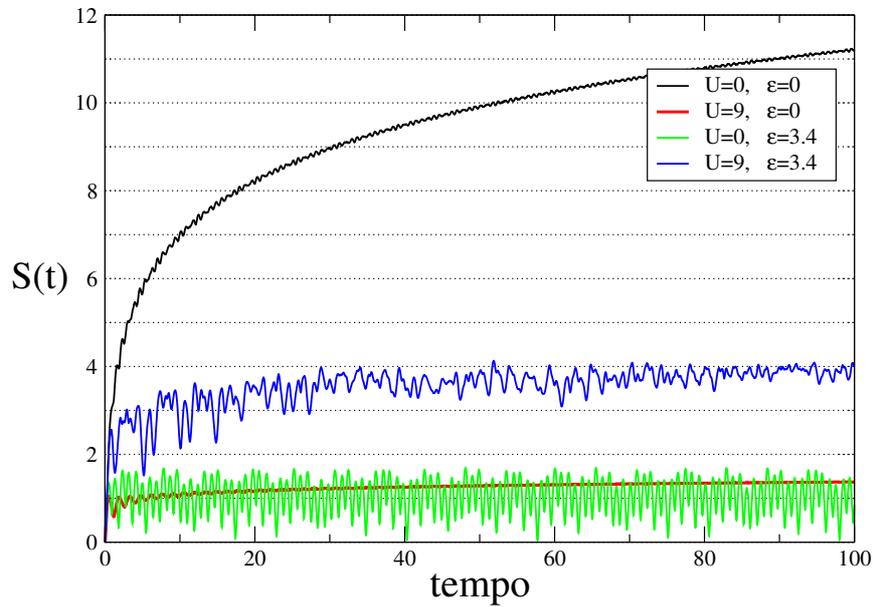
Estas funções, assim como a própria função de onda, variam com o tempo e todas atingem um mínimo global quando a função está localizada em um único sítio. Esta última propriedade é a de maior interesse, pois nos permite determinar com precisão¹ o estado de localização do sistema. Por exemplo, calculando a entropia de Shannon e o número de Wegner para as combinações de parâmetros usadas nas figuras 1.1, 1.3, e 1.5, mais o caso $U = 9$ e $\varepsilon = 3.4$, com a desordem seguindo a equação (1.8) obtém-se quatro curvas distintas (fig. 2.1(a)). Estas curvas caracterizam todos os comportamentos que podem ser apresentados pelo sistema e também nos permitem diferenciar um do outro.

Logo se nota que o caso espalhado (S e W grandes) está visivelmente separado dos outros. Esta separação tende a aumentar com o tempo enquanto a função converge para $\ln(N^2)$ na fig. 2.1(a) e para N^2 na fig. 2.1(b), sendo N a largura da rede $N \times N$. As duas curvas inferiores (vermelha e verde) de cada gráfico apresentam o comportamento característico do sistema já descrito anteriormente, valendo salientar que ambas funções descritivas são capazes de diferenciar entre um sistema localizado por desordem (oscilações irregulares) e outro por não-linearidade (oscilações amortecidas). Ainda nessas curvas, verifica-se que não se pode usar ambas funções simultaneamente como definição do nível de localização do sistema, já que a entropia é maior em média no sistema não-linear, mas o número de Wegner converge para um valor maior no sistema desordenado.

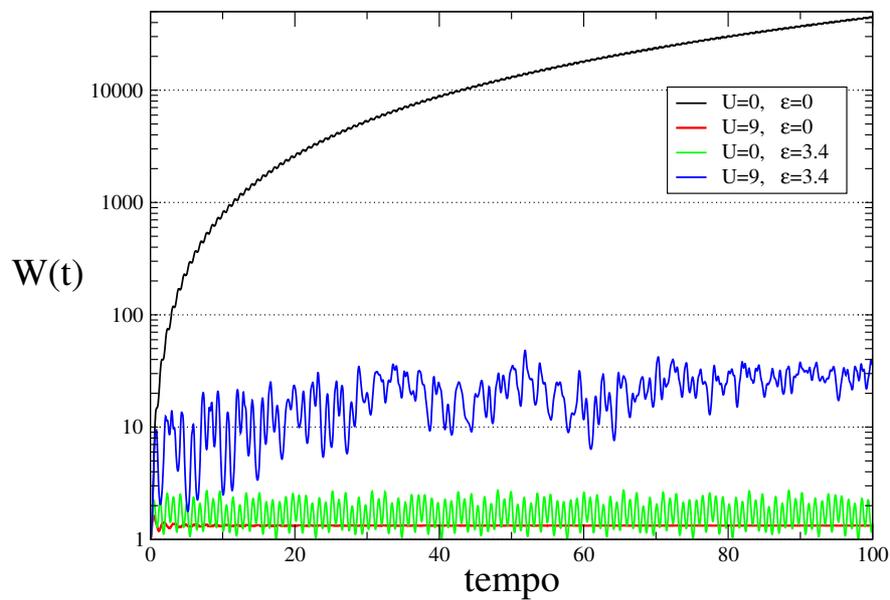
Por último, a quarta curva (azul) de cada um dos gráficos manifesta o nosso objeto de interesse. Ela exemplifica o efeito de deslocalização mencionado na introdução, em que a adição de desordem a um sistema que já localizaria pela não-linearidade (ou vice-versa) torna a função de onda menos localizada. Como veremos adiante, essa deslocalização depende fortemente dos valores de U e ε , entre outros fatores, se restringindo a uma faixa relativamente larga destes parâmetros.

Com o objetivo de documentar com detalhes essa dependência é necessário resumir o estado de dispersão descrito por cada uma destas curvas em um único número. Como pode-se ver, ambas funções descritivas oscilam em torno de um valor de equilíbrio quando a função de onda se localiza. O número que buscamos é esse valor de equilíbrio, e, para isso, calculamos a média temporal de cada uma delas ao longo da segunda metade do intervalo de tempo integrado. Nos casos localizados, o resultado é um número que descreve o quão disperso está o sistema e que está associado a um dado valor dos parâmetros do sistema. Nos casos espalhados, o resultado também é um número associado aos parâmetros do sistema, mas que representa apenas de forma qualitativa com que velocidade a função de onda está se dispersando.

¹Exceto dentro de uma pequena região em que ocorre a transição do espalhado para o localizado, onde seria necessário mais tempo para definir se houve ou não localização.



(a) $S(t)$ para quatro combinações diferentes de desordem e não-linearidade.



(b) $W(t)$ em escala logarítmica no eixo Y , para quatro combinações diferentes de desordem e não-linearidade.

Figura 2.1: De cima para baixo na caixa de legenda tem-se: a evolução de partícula livre, a localização por não-linearidade, a localização por desordem e a deslocalização.

Concluído este passo, todo o processo até aqui é repetido para uma grande variedade de valores para U e ε , sempre calculando o número em questão e associando-o ao par de parâmetros. O resultado é um conjunto de pontos para cada uma das funções descritivas, descrevendo os seus valores estacionários como função dos parâmetros do sistema. Usando estes pontos, contrói-se um gráfico, denominado diagrama de fases, para cada uma das funções que ilustra o estado de localização do sistema como função dos parâmetros U e ε . Isto nos permite avaliar de forma extensa e detalhada que influência a desordem e a não-linearidade tem sobre a dispersão da função de onda. Por último, cada um destes gráficos é construído para cada uma das três configurações de desordem (eqs. 1.6, 1.7, 1.8)

3 *Resultados*

Os gráficos da entropia de Shannon (fig. 3.1, 3.3, e 3.6) são os mais compactos. Como esta é uma função logarítmica, ela assume valores moderados na região de não localização, o que permite que o comportamento da região localizada (\mathcal{S} e \mathcal{W} pequenos) não seja ofuscado. O número de Wegner, no entanto, tende a valores muito maiores quando diverge (da ordem de 10^4), o que acaba por ocultar as características do gráfico nas outras regiões. Dentre as três figuras construídas com esta função (fig. 3.2, 3.4, e 3.7), na segunda delas foi necessário olhar mais de perto para evitar a perda de detalhes. Truncando o gráfico em $z = 20$, tem-se a figura 3.5. Como será melhor detalhado nas próximas seções: o diagrama 3.2 não possui detalhes que justifiquem uma segunda figura de Wegner, e o diagrama 3.7 já contém as informações que queremos mostrar.

3.1 Primeiro Caso

$$\varepsilon_{i,j} = \varepsilon[\cos(2\pi\sigma i) + \cos(2\pi\sigma j)] \quad (3.1)$$

As figuras 3.1 e 3.2 expressam o estado de localização de um elétron que é largado em um ponto de máximo do potencial da desordem (eq. 3.1) e delas já se pode confirmar para o nosso sistema bidimensional aquilo que se sabe ocorrer em uma dimensão. A localização por desordem é bem mais gradual que do que a localização por não-linearidade. A primeira parece ocorrer para um valor de ε_{local} próximo de 3, semelhante mas maior que o unidimensional. Já a segunda depende de valores de U significativamente maiores do que eram necessários em uma dimensão ($7 < U_{crit} < 8$).

Destes gráficos também já surge o primeiro resultado importante: o efeito de deslocalização que buscamos não se manifesta nessa situação. Isso pode ser concluído diretamente por análise de qualquer um dos três gráficos. Partindo de um ponto sobre o eixo U , seja este localizado ou não, um aumento no valor de ε sempre torna a função mais localizada, o mesmo acontece

partido-se do eixo ε . Assim se percebe que, sob esta condição inicial, a interação entre os dois parâmetros é extremamente linear. O limiar de localização para regiões fora dos eixos se aproxima de uma reta que liga os limiares de cada eixo. Ao longo desta reta, a localização gradualmente passa de abrupta (quando próximo do eixo U) para suave (quando próximo do eixo ε).

A única exceção à ausência de deslocalização é o comportamento que vemos na figura 3.2 ao longo do eixo U , que se trata de um máximo da coordenada z (média do número de Wegner) posicionado em $U \approx 7$. Esta anomalia não representa o efeito que buscamos, pois não inclui interação entre desordem e não-linearidade, mas é também merecedor de atenção. Ela mostra que é possível o elétron se espalhar mais rapidamente que uma partícula livre, logo antes de se atingir o limiar de localização da não-linearidade.

3.2 Segundo Caso

$$\varepsilon_{i,j} = \varepsilon[\cos(2\pi\sigma i) - \cos(2\pi\sigma j)] \quad (3.2)$$

Os gráficos 3.3, 3.4, e 3.5 descrevem o comportamento de um elétron que é posicionado em repouso sobre a origem de uma rede com a desordem (3.2). Nesta situação a energia potencial no sítio inicial é maior que seu dois vizinhos sobre o eixo X mas menor que seus vizinhos no eixo Y . A princípio, a versão completa do diagrama de Wegner pode dar a impressão de que o efeito procurado também não ocorre neste caso. No entanto, uma análise das figuras 3.3 e 3.5 exibem com clareza o surgimento da deslocalização. É fácil verificar que a anomalia presente nesses gráficos é realmente o efeito descrito na introdução, basta ver que no ponto $U = 9, \varepsilon = 3$ a função de onda está mais espalhada do que ela está no ponto $U = 0, \varepsilon = 3$ e no ponto $U = 9, \varepsilon = 0$. O mesmo comportamento se repete para várias combinações dos parâmetros, descrevendo claramente uma faixa ao longo do domínio $U \times \varepsilon$. Pode se ver que o efeito se mostra mais acentuado como uma deslocalização induzida por acréscimo de desordem, já que esta faixa se mostra bem mais inclinada em direção ao eixo U . A delocalização induzida por não-linearidade também está presente (compare os pontos $U = 9, \varepsilon = 3$ e $U = 0, \varepsilon = 3$ no diagrama 3.3), mas é menos acentuada.

A tendência do número de Wegner a crescer rapidamente quando o elétron se espalha facilita bastante a distinção de estados realmente espalhados daqueles que apenas são menos deslocalizados (uma distinção que seria mais difícil pela entropia). A fig. 3.4 não deixa dúvidas de que a região no espaço dos parâmetros que leva ao espalhamento é maior nesse caso do que

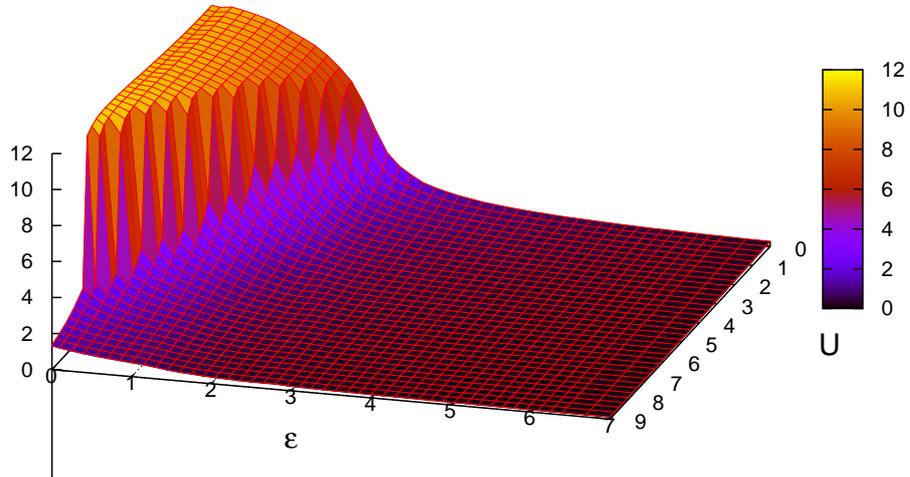


Figura 3.1: Gráfico da Entropia de Shannon com a origem como ponto de máximo.

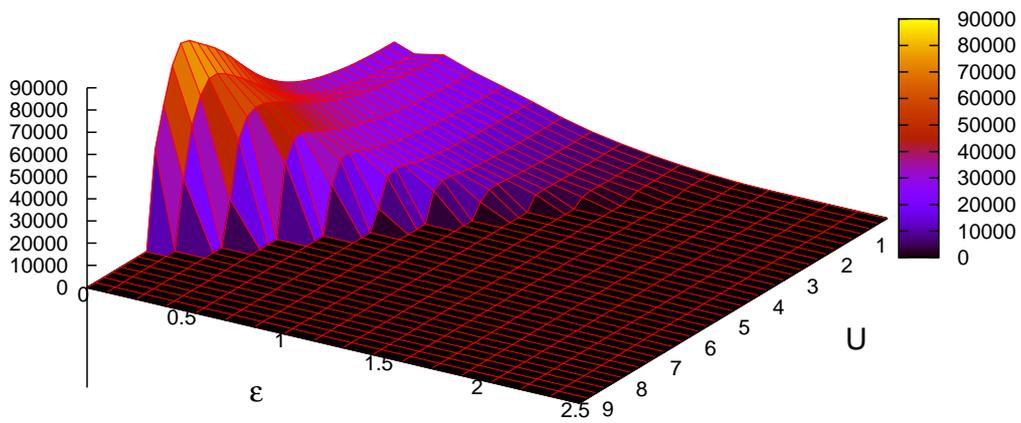


Figura 3.2: Gráfico do Número de Wegner com a origem como ponto de máximo.

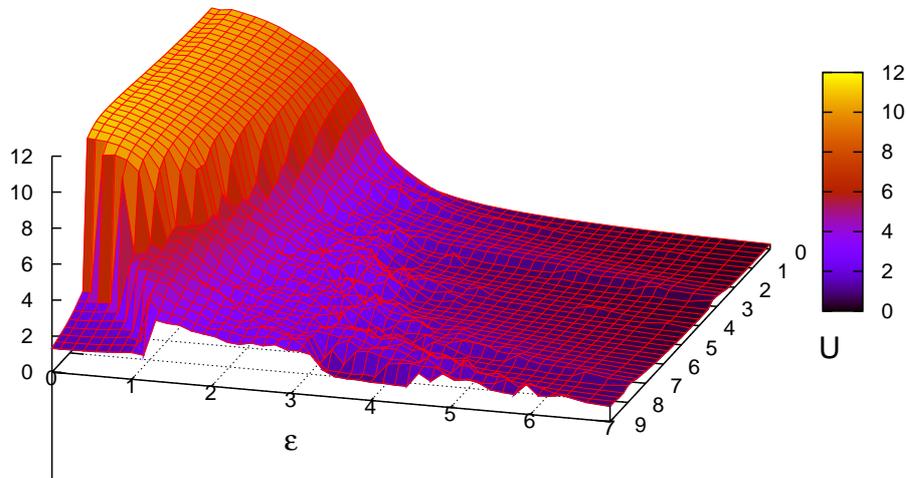


Figura 3.3: Gráfico da Entropia de Shannon com a origem como ponto de sela.

no anterior (fig. 3.2), já que surge um "levantamento" da média do número de Wegner em uma região em que antes se encontrava o limiar de localização. Não é de se surpreender que essa região aponte na mesma direção da faixa de deslocalização, o que leva a crer que as duas são o mesmo efeito, apenas em ordens de grandeza diferentes.

Finalmente, também se vê que a suavidade presente no caso anterior desaparece completamente dentro da faixa de deslocalização. Dentro desta região, tanto a superfície do gráfico 3.3 quanto a do gráfico 3.5 se tornam altamente irregulares. Isso mostra que a velocidade e a dimensão do espalhamento não são uma função simples dos parâmetros do sistema neste intervalo de valores. Como a função de Wegner fornece uma noção do número de sítios ocupados pelo elétron, e como o gráfico 3.5 expressa a média desta função, concluímos que dentro da região de delocalização a função de onda se estende até ocupar de 5 a 10 sítios.

3.3 Terceiro Caso

$$\varepsilon_{i,j} = -\varepsilon[\cos(2\pi\sigma i) + \cos(2\pi\sigma j)] \quad (3.3)$$

Por último, as figuras 3.6 e 3.7 exibem o estado de localização de um elétron que é colocado

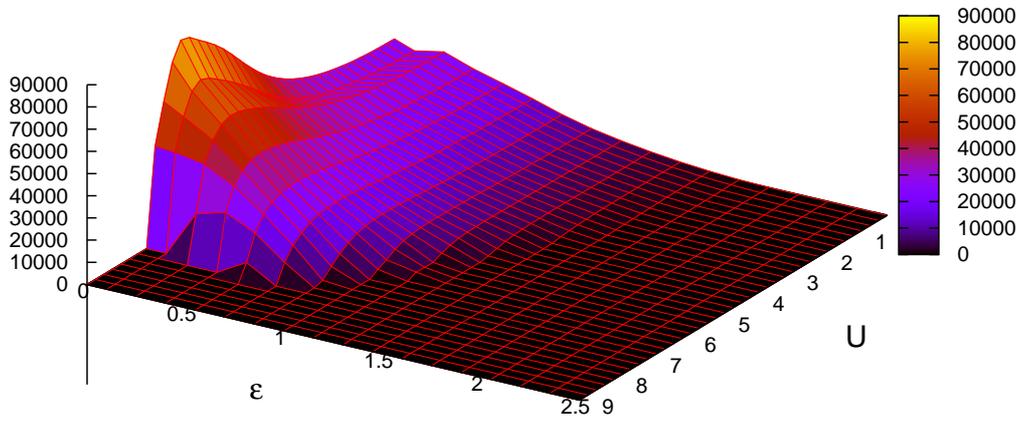


Figura 3.4: Gráfico do Número de Wegner com a origem como ponto de sela.

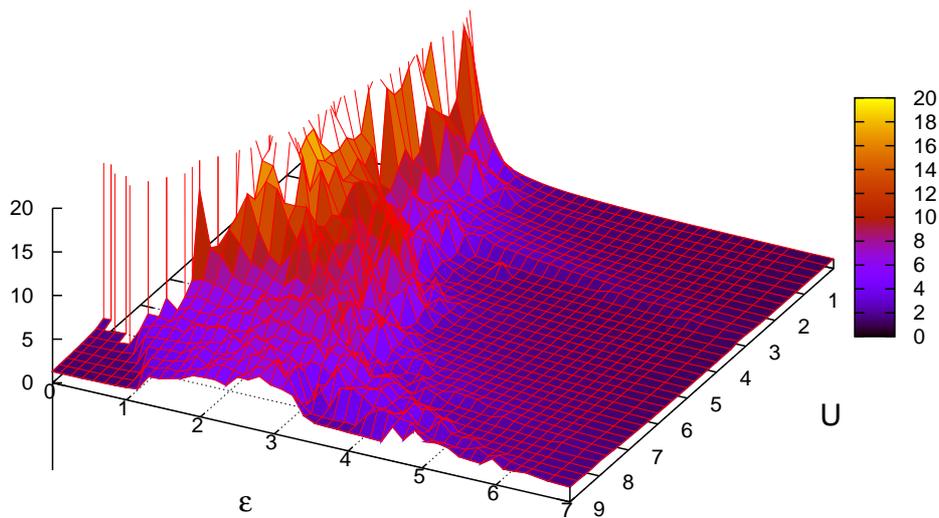


Figura 3.5: Gráfico do Número de Wegner truncado com a origem como ponto de sela.

em repouso sobre a origem de uma rede com a configuração (3.3), de modo que o potencial no sítio inicial é menor que em todos os primeiros vizinhos. A primeira curiosidade que se nota é: ao contrário do que conhecemos para o caso de sistemas contínuos, um elétron posicionado sobre um mínimo de desordem de uma rede discreta acaba por ser menos estável que um elétron posicionado sobre um máximo. Isso, claro, é uma manifestação do efeito de deslocalização, ausente nesta última situação. Nos diagramas 3.6 e 3.7 no entanto, o efeito não só está presente como está bastante intensificado comparado com a seção (3.2). Dessa vez a região espalhada se estende até o limite do gráfico ($U = 9$), se sobrepondo à região de deslocalização. As menores alturas presentes nessa região do gráfico de Wegner ($U \approx 9$, $\varepsilon \approx 0.75$) mostram que a velocidade de espalhamento nessa região é menor que a velocidade do espalhamento livre. Isso leva a conclusão de que esta região de espalhamento não se trata de uma extensão para grandes valores de U do comportamento de partícula livre, mas sim de uma intensificação do efeito de deslocalização presente nessa região (que pode ser visto na fig. 3.3).

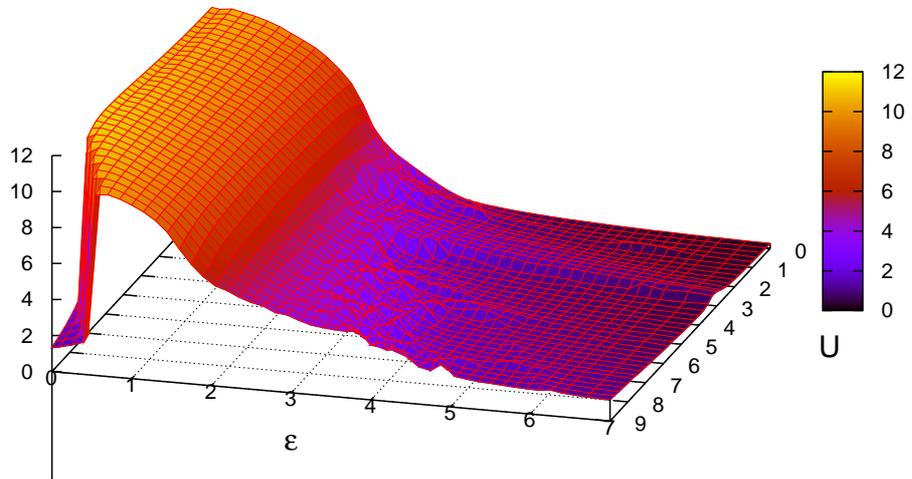


Figura 3.6: Gráfico da Entropia de Shannon com a origem como ponto de mínimo.

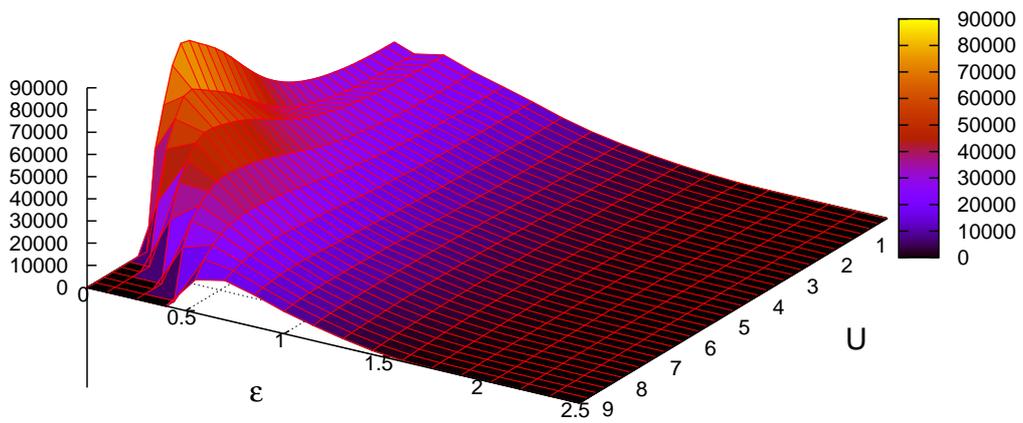


Figura 3.7: Gráfico do Número de Wegner com a origem como ponto de mínimo.

4 Conclusão

Neste trabalho realizamos um estudo numérico da Equação de Schrödinger Discreta Não-Linear em duas dimensões, adicionando um termo de desordem determinística seguindo o modelo de Aubry-André. Buscávamos, com isto, explorar e detalhar o tópico recentemente apresentado na literatura, de perda da localização por uma não-linearidade fraca [6].

Como já se esperava, o efeito de deslocalização depende fortemente dos parâmetros do sistema, mas vai muito além do que apenas o caso de não-linearidade fraca, se intensificando quando U se aproxima (ou passa) de U_{crit} . Também, uma desordem da grandeza certa pode espalhar até mesmo um sistema altamente não-linear. Por outro lado, basta que esta desordem seja um pouco mais intensa, para voltar a tornar o sistema completamente localizado. Dentro do intervalo de deslocalização, a dependência do espalhamento com os parâmetros é irregular e difícil de descrever. Além disso, verificamos que a configuração de desordem também influencia a existência e a intensidade do efeito de deslocalização.

Neste tópico, encontramos fortes indicações de que, dados U e ε dentro de um intervalo adequado, há uma relação direta entre o estado de localização de um elétron e a energia potencial no sítio em que ele é posto (em comparação com a média do potencial). Isso se apóia no fato de que o efeito de deslocalização não existe no primeiro caso, existe no segundo, e existe com ainda maior intensidade no terceiro, onde os casos estão ordenados por ordem decrescente do potencial de Aubry-André na origem. Para verificar esta afirmativa, se faz necessário uma análise semelhante para uma variedade maior de configurações de desordem, possivelmente acrescentando fases ao argumento dos cossenos de forma a alterar a energia potencial na origem sem afetar a sua média nem a sua imagem $[-2\varepsilon, 2\varepsilon]$.

Finalmente, as análises do primeiro caso mostram que, na ausência do efeito de deslocalização, a interação entre a desordem e não-linearidade é altamente linear. O caráter retilíneo do limiar de localização na superfície (3.1), mostra que ele deve obedecer uma equação do tipo

$$\frac{U}{U_{crit}} + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{local}} = 1 \quad (4.1)$$

Como mencionado na introdução, a suavidade da localização por desordem dificulta o cálculo numérico do limiar ε_{local} tanto sobre o eixo ε quanto nas proximidades (onde o limiar ainda mantém o caráter suave). No entanto, com a equação (4.1), se o ε_{local} for conhecido de um resultado analítico e se U_{crit} for conhecido ou estimado, é possível descrever com boa aproximação a forma de todo o limiar. Isso, é claro, deixa de valer quando a desordem não segue a configuração (1.6) correspondente ao primeiro caso. Contudo, a configuração (1.8) é simplesmente o negativo da (1.6), o que significa que os gráficos do terceiro caso podem ser associados ao eixo negativo dos gráficos do primeiro caso. Ainda mais, se estendermos a reta (4.1) para $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ a nova equação se encaixa com o limiar de localização presente no canto inferior esquerdo do gráfico 3.6, lembrando que ε_{local} ainda deve corresponder ao limiar do primeiro caso (fig. 3.1). Ou seja, apesar de já termos concluído que o elétron não se comporta bem como uma partícula livre na região de deslocalização do gráfico 3.6, essa região tem a forma de um prolongamento da região de partícula livre do gráfico de desordem positiva.

Por último, vale a pena repetir alguns resultados apresentados nos capítulos anteriores por serem novos ou pouco conhecidos:

- A suavidade da localização por desordem caracteriza um regime de transição;
- O processo abrupto que é a localização por não-linearidade caracteriza uma mudança de fase;
- Há um levantamento do número de participação de Wegner sobre o eixo U logo antes da localização ($U \approx 7$). A não linearidade provoca uma deslocalização por conta própria, muito próximo do limiar U_{crit} .

Referências Bibliográficas

- [1] JUNGES, L. A Equação de Schrödinger Não-Linear Discreta com Desordem de Aubry-André e com Campo Elétrico DC, *Dissertação de mestrado, IF-UFRGS* (2009)
- [2] GAUL, C. *et. al.* Stable Bloch Oscillations of Cold Atoms with Time-Dependent Interaction, *Phys. Rev. Lett.* **102** 255303 (2009)
- [3] JOHANSSON, M. *et. al.* Effects of nonlinearity on the time evolution of single-site localized states in periodic and aperiodic discrete systems, *Phys. Rev. B* **52** 1 231-240 (1995)
- [4] NAZARENO, H. N.; LÉPINE, Y. Dynamical localization in two- and three-dimensional tight-binding systems under electric fields, *Phys. Rev. B* **55**, 6661 (1997)
- [5] AUBRY, S.; ANDRÉ, G. Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices, *Ann. Israel Phys. Soc.* **3** 133-140 (1980)
- [6] PIKOVSKY, A. S.; SHEPELYANSKY, D. L. Destruction of Anderson localization by a weak nonlinearity, *Phys. Rev. Lett.* **100** 094101 (2008)
- [7] MOLINA, M. I. Nonlinearity in materials science, *Int. J. Mod. Phys. B* **15** 18 2409-2432 (2001)
- [8] S. ZHITOMIRSKAYA; J. BURGAIN, Absolutely continuous spectrum for 1D quasiperiodic operators, *Invent. Math.* **148** , n.3, 453-463 (2002)
- [9] PRESS, H. W. *et. al.* Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing, second edition, Cambridge University Press, Volume I (2001)
- [10] LEDERER, F. *et. al.* Discrete solitons in optics, *Phys. Rep.* **463** 1-126 (2008)
- [11] HARTMANN, T. *et. al.* Dynamics of Bloch oscillations, *New J. Phys.* **6** 2 (2004)
- [12] CASTRO NETO, A. H. Introduction to Condensed Matter Physics Notas de aula, Boston University, Department of Physics (2008)