



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Transporte de Carga e Transferência de Estados
Quânticos em Geometrias de Baixa Dimensionalidade
Desordenadas**

RENATO FERREIRA DUTRA

Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

MACEIÓ-AL
JANEIRO DE 2023

RENATO FERREIRA DUTRA

**Transporte de Carga e Transferência de Estados
Quânticos em Geometrias de Baixa Dimensionalidade
Desordenadas**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para a obtenção do grau de **Doutor em Física**.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

MACEIÓ-AL
JANEIRO DE 2023

RENATO FERREIRA DUTRA

**Transporte de Carga e Transferência de Estados
Quânticos em Geometrias de Baixa Dimensionalidade
Desordenadas**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para a obtenção do grau de **Doutor em Física**.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura
(Orientador - UFAL)

Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida
(Membro Interno - UFAL)

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra
(Membro Interno - UFAL)

Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza
(Membro Externo - UFS)

Prof. Dr. Aduino José Ferreira de Souza
(Membro Externo - UFRPE)

Tese aprovada em: 10/01/2023



PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
TESE DE DOUTORADO

“Transporte de Carga e Transferência de Estados Quânticos em
Geometrias de Baixa Dimensionalidade Desordenadas”

por

Renato Ferreira Dutra

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador e presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Guilherme Martins Alves de Almeida, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; André Maurício Conceição de Souza, da Universidade Federal de Sergipe e Adauto José Ferreira de Souza, da Universidade Federal Rural de Pernambuco, consideram o candidato **aprovado com conceito “ B ”**.

Maceió, 10 de janeiro de 2023.

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida

Documento assinado digitalmente



MARCELO LEITE LYRA
Data: 12/01/2023 10:46:37-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza

Documento assinado digitalmente



ADAUTO JOSE FERREIRA DE SOUZA
Data: 12/01/2023 10:32:08-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza

Para:

À minha família.

Especialmente meus pais, **Maria de Lourdes** e **Francisco Sales**.

Meu filho, **Ruan Dutra**.

Meu irmão, **Renan Dutra**.

Minha esposa, **Ana Paula**.

Pensamento:

“A mente que se abre a uma nova ideia jamais voltará ao seu tamanho original”

(Albert Einstein).

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pela vida e por ter me dado saúde e força para superar as dificuldades nessa jornada.

Aos meus pais, *Maria de Lourdes Ferreira Dutra* e *Francisco Sales Dutra*, pois são as pessoas mais importantes na minha vida, que me ensinaram os valores morais e éticos para viver com dignidade, e sempre me ajudaram quando precisei. Ao meu irmão, *Renan Ferreira Dutra*, as minhas tias *Francisca Ferreira*, *Luciana Ferreira*, *Elza Dutra* e *Edwirgens Dutra*, aos meus avós, e aos demais familiares.

Ao meu filho, *Ruan da Costa Dutra* pelo seu sorriso que alegra todos os meus dias.

À minha esposa, *Ana Paula Costa* pelo companheirismo durante essa jornada.

Ao meu primo, *Prof. Dr. Joseclécio Dutra Dantas*, professor de Física da UFCG/CES, por servir como inspiração dentro e fora da vida acadêmica.

Agradeço ao meu orientador, *Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura*, pela paciência, disponibilidade e dedicação na elaboração deste trabalho. Também agradeço pela força e pelos conselhos recebidos nos momentos difíceis dentro e fora do ambiente acadêmico, principalmente neste último ano.

Agradeço a todos os professores, por compartilharem o conhecimento durante esse

processo de formação profissional e pela dedicação incansável.

Ao meu amigo *Isaac Félix* pela força e conselhos nos momentos difíceis, principalmente neste último ano.

Aos colegas e amigos do Instituto de Física da UFAL, *Ângela Silva, Caio Mendes, Dmitry Messias, José Robson, Paulo Ribeiro, Rosinildo Fideles e Wagner Porto*, pela oportunidade e pelo privilégio que nos foram dados em compartilhar tamanha experiência ao frequentar este curso de Pós-Graduação.

À Universidade Federal de Alagoas (UFAL) e ao Instituto de Física (IF), pelas condições proporcionadas.

Aos Funcionários do IF-UFAL pelos serviços prestados.

À CAPES e FAPEAL, pelo tempo em que foi possível o apoio financeiro.

RESUMO

Neste presente trabalho, estudamos a dinâmica de um elétron em dois sistemas bidimensionais (2D) sob o efeito de um campo elétrico externo. Em ambos os casos investigamos a evolução temporal de um pacote de ondas inicialmente localizado, usando um formalismo de Taylor para resolver o conjunto de equações de Schrödinger. No primeiro caso, consideramos uma rede quadrada com os termos de hopping distribuídos de maneira aperiódica. Os resultados obtidos sugerem que uma propagação rápida de elétrons (dinâmica balística) é encontrada para uma faixa de valores do grau de aperiodicidade ν do sistema. Ao inserir o efeito de um campo elétrico estático no modelo, verifica-se a existência de um comportamento oscilatório semelhante a dinâmica eletrônica em sistemas cristalinos, ou seja, em que exibem “oscilações de Bloch”. A frequência ω e o tamanho L_E dessas oscilações são investigados e os resultados encontrados são comparados com a abordagem semi-clássica, resultando em uma boa concordância com comportamento padrão. No segundo caso, consideramos uma rede quadrada com os termos de hopping com desordem correlacionada. Nossos resultados indicaram que a desordem correlacionada promove uma propagação eletrônica rápida para tempos intermediários. Quando inserimos um campo elétrico, também observamos um comportamento similar as “oscilações de Bloch”. A frequência obtida para este segundo caso também está em boa concordância com os previstos pela abordagem semi-clássica. Apesar da ausência de estados estendidos e com base na desordem inserida no modelo, discutimos a

estabilidade dessas aparentes “oscilações de Bloch”. Também investigamos a transferência de estados quânticos (QST) em um canal com desordem não correlacionada na diagonal, conectado a um emissor (S) e um receptor (R). Usamos algumas medidas do grau de localização para poder avaliar as propriedades de localização ou deslocalização do canal proposto para QST. Os resultados revelaram que dentro de um determinado limite de desordem fraca, a transferência de estados quânticos ocorre com boa fidelidade.

Palavras-chave: Desordem, Dinâmica, Aperiodicidade, Oscilações de Bloch, QST, fidelidade.

ABSTRACT

In this present work, we study the dynamics of an electron in two-dimensional systems (2D) under the effect of an external electric field. In both cases we investigate the time evolution of an initially localized wave packet, using a Taylor formalism to solve the set of Schrödinger equations. In the first case, we consider a square lattice with the hopping terms distributed aperiodically. The obtained results suggest that fast propagation of electrons (ballistic dynamics) is found for a range of values of the degree of aperiodicity ν of the system. By inserting the effect of a static electric field in the model, it is verified the existence of an oscillatory behavior similar to the electronic dynamics in crystalline systems, or that is, where they exhibit “ Bloch oscillations”. The frequency ω and the size L_E of these oscillations are investigated and the results found are compared with the semi-classical approach, resulting in good agreement with default behavior. In the second case, we consider a square lattice with the hopping terms with correlated disorder. Our results indicated that the correlated disorder promotes a fast electronic propagation fast for intermediate times. When we insert an electric field, we also observe behavior similar to “Bloch oscillations”. The frequency obtained for this second case is also in good agreement with those predicted by the semi-classical approach. Despite the absence of extended states and based on the disorder inserted in the model, we discuss the stability of these apparent “Bloch oscillations”. We also investigated the quantum state transfer (QST) in a channel with diagonally uncor-

related disorder, connected to an sender (S) and a receiver (R). We use some measures of the degree of localization in order to evaluate the localization or non-localization properties of the proposed channel for QST. The results revealed that within a certain limit of weak disorder, the transfer of quantum states occurs with good fidelity.

Keywords: Disorder, Dynamics, Aperiodicity, Bloch Oscillations, QST, fidelity.

SUMÁRIO

Agradecimentos	vi
Resumo	viii
Abstract	x
Sumário	xii
Lista de Figuras	xv
1 Introdução	1
2 Fundamentação Teórica	8
2.1 Rede Cristalina e o Teorema de Bloch	9
2.2 Modelo de Anderson	14
2.3 Teoria de Escala para a Transição de Anderson	19
2.4 Desordem com Correlações	23

2.5	Medidas do Grau de Localização	26
2.5.1	Quantidades Independentes do Tempo	27
2.5.2	Evolução Temporal e Quantidades Dependentes do Tempo	31
2.6	Efeito do Campo Elétrico	37
2.7	Introdução a computação quântica: Alguns conceitos fundamentais	42
2.7.1	Bits e Qubits (Q-bits)	43
2.7.2	Emaranhamento	44
2.8	Protocolo de transferência de estado quântico em cadeias de spins	46
2.9	Concorrência	51
3	Dinâmica Eletrônica em Sistemas Aperiódicos 2D sob Efeito de um Campo Elétrico Estático	54
3.1	Introdução	55
3.2	Modelo e Formalismo	55
3.3	Resultados	58
4	Transporte de carga em sistemas desordenados bidimensionais com campo elétrico externo	66
4.1	Introdução	67
4.2	Modelo e Formalismo	67
4.3	Resultados	71
5	Transferência de estado quântico com boa fidelidade em cadeias desordenadas do tipo diamante	78
5.1	Introdução	79
5.2	Modelo e Formalismo	79

5.3 Resultados	81
6 Considerações Finais e Perspectivas	91
Referências Bibliográficas	96
Apêndices	106
A Protocolo de transferência de estado quântico em canais de cadeias de spin	106
A.1 Traço Parcial	106
A.2 Fidelidade	107
Apêndices	111
B Artigos Publicados	111
B.1 Electronic Dynamics in 2D Aperiodic Systems under Effect of Electric Field	111

LISTA DE FIGURAS

2.1	A periodicidade espacial do potencial U vem da periodicidade da rede. \mathbf{R} é um vetor da rede que localiza os íons e \mathbf{r} é o vetor que localiza o elétron. . .	12
2.2	Representação de uma rede quadrada 2D cristalina perfeita e com diferentes tipos de desordem.	15
2.3	Representação da função de onda típica.	16
2.4	Representação do comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ em função da condutância g , para as dimensões $D = 1, 2$ e 3	22
2.5	(a) Potencial com desordem correlacionada de longo-alcance com $N = 2 \times 10^5$ e $\alpha = 0, 0.5, 1.5$. (b) O comportamento da densidade espectral $S(k) \propto 1/k^\alpha$ para $\alpha = 0, 1.5$ e 3	25
2.6	Esquema da rede unidimensional sob ação de um campo elétrico estático paralelo ao sistema.	38

2.7	Representação da dinâmica eletrônica sob ação de um campo elétrico dentro da zona de Brillouin. O elétron inicia seu movimento com k_0 , em seguida no instante t_1 , o k cresce linearmente até chegar no valor de π e depois rejeitado até o outro extremo com valor $-\pi$. O valor continua crescendo linearmente até retornar ao valor inicial k_0	40
2.8	(a) Posição média eletrônica em função do tempo em um sistema unidimensional sem desordem ($W = 0$) sob ação de um campo elétrico ($E = 0.25$ e 0.5), observa-se claramente o movimento oscilatório. (b) Posição média $\langle n \rangle$ em função da frequência ω , o movimento oscilatório com frequência $\omega \approx E$ está de acordo com a abordagem semiclassica.	41
2.9	(a) Posição média eletrônica em função do tempo em um sistema unidimensional com desordem ($W \neq 0$) sob ação de um campo elétrico ($E = 0.25$ e 0.5), observa-se a ausência do comportamento oscilatório, ou seja, a inexistência de uma oscilação coerente. (b) A existência de várias frequências no movimento eletrônico.	42
2.10	A esfera de Bloch é uma representação geométrica dos estado de um <i>qubit</i> , onde os pólos são os autoestados computacionais, $ 0\rangle$ e $ 1\rangle$	45
2.11	Representação de um grafo arbitrário de spins, no qual a comunicação ocorre do spin s (emissor) para o spin r (receptor). Os vértices representam os spins e as arestas as conexões entre os spins.	47
2.12	Representação do protocolo de comunicação quântica entre Alice e Bob, que se encontram nos extremos opostos da cadeia.	48
2.13	As barras representam a fidelidade máxima F da comunicação e a curva o emaranhamento máximo compartilhável como função de N ($N = [2, 80]$) em intervalo de tempo $[0, 400/J]$. Também temos que o tempo t_0 no qual este máximo é alcançado varia com N e a linha horizontal representa a maior fidelidade para uma transmissão clássica de um estado quântico $[1, 2]$	51

3.1	(a) Desvio médio quadrático σ versus t para $E_x = E_y = 0$ e $\nu = 0.5, 0.75, 1.5, 2$. Os resultados indicam que para $\nu < 1$, a função de onda exibe aproximadamente uma propagação balística, ou seja, $\sigma(t) \propto t^\beta$ com $\beta \approx 1$. (b) O expoente β versus ν considerando ν dentro do intervalo $[0.1, 1.5]$, onde calculamos β utilizando $\pi\alpha = 0.2$ até 2.0.	60
3.2	(a), (c) Posição média eletrônica $R(t)$ versus t para $E_x = E_y = E = 0.5$ com $\nu = 0.5$ e 1.5. (b),(d) A transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω para os respectivos casos (a) e (b).	62
3.3	(a), (c) Posição média eletrônica $R(t)$ versus t para $E_x = E_y = E = 0.7$ com $\nu = 0.5$ e 1.5. (b),(d) A transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω para os respectivos casos (a) e (b).	63
3.4	(a) $R(t)$ versus t para $\nu = 0.5$ e $E = 0, 2, 0.4, 0.6, 0, 8$. (b) O tamanho L_E versus $1/E$ com $\nu = 0.5$	65
4.1	Perfil de hopping completo $h_{i,j}$ versus i e j para $A = 1, 20, 40, 60$	69
4.2	A função de autocorrelação $C(r)$ versus r para os dados encontrados nas Figuras 4.1(a-d).	70
4.3	(a) O número de participação redimensionado para tempo longo $P_\infty/N^2 = P(t \rightarrow \infty)/N^2$ versus A para $N = 300$ até 1200. (b) A função de autocorrelação temporal $\Theta(t)$ para $A = 1, 20, 40$	73
4.4	A variância local Δ da distribuição de hopping versus A , onde a desordem local diminui à medida que o valor de A aumenta.	74

4.5	Posição média eletrônica $R(t)$ versus (Figura à esquerda) e a transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω (Figura à direita), para $A = 1, 20, 40$ com $E = 0.25$, onde observamos que o pacote de onda permanece preso em torno da posição inicial e exibe uma dinâmica oscilatória com uma frequência de aproximadamente $\omega = E = 0.25$. Para $A = 1$, o potencial desordenado quase não correlacionado amortece a dinâmica oscilatória e a dinâmica coerente com uma única frequência está ausente.	75
4.6	Posição média eletrônica $R(t)$ versus (Figura à esquerda) e a transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω (Figura à direita), para $A = 1, 20, 40$ com $E = 0.5$, onde observamos que o pacote de onda permanece preso em torno da posição inicial e exibe uma dinâmica oscilatória com uma frequência de aproximadamente $\omega = E = 0.5$. Para $A = 1$, o potencial desordenado quase não correlacionado amortece a dinâmica oscilatória e a dinâmica coerente com uma única frequência está ausente.	76
4.7	O número de participação redimensionado para tempo longo $P_\infty/N^2 = P(t \rightarrow \infty)/N^2$ versus E para $N = 1200$ $A = 40$	76
4.8	A posição média $R(t)$ versus t para $E = 0.1$ e $A = 1, 20, 40$. Para tempo longo, a desordem promove a diminuição do quadro oscilatório, e as dinâmicas convergem para uma dinâmica padrão de localização.	77
5.1	Representação pictórica do modelo. Os sítios 1 e N representam o emissor (S) e receptor (R), possuem energias locais ϵ_S e ϵ_R , respectivamente. O g é o hopping dos sítios 1 e N com o canal diamante. No canal os acoplamentos τ são todos iguais a 1 e as energias on-sites são números aleatórios não correlacionados dentro do intervalo $[-W/2, +W/2]$	79
5.2	A densidade de estados (DOS) versus a energia E para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 4200$. A escala de energia em nosso modelo é o hopping médio efetivo ao longo do sistema completo, ou seja, aproximadamente $\tau = 1.0$	84

5.3	(a-d) O número de participação $P(E)$ versus energia E para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 1200, 2100, 4200$	85
5.4	(a-d) A entropia de Shannon $S(E)$ versus energia E para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 1200, 2100, 4200$. Esse resultados estão em boa concordância com os mostrados na Figura 5.3, onde todos os autoestados permanecem localizados.	86
5.5	O número de Participação médio $\langle P \rangle$ versus N calculado para região de energia $ E < 1$ e $W = 0.1$	87
5.6	(a-d) A fidelidade máxima versus ε para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, $g = 0.01$, $\tau = 1$ e $N = 120$. Para $0 < W < 1$, a $F_{\text{máx}}$ permanece acima de 0.94 indicando boa fidelidade para a transferência de estados quânticos. Para $W > 1$ a transferência de estado quântico está ausente.	89
5.7	(a-d) A concorrência máxima versus ε para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, $g = 0.01$, $\tau = 1$ e $N = 120$. Para $0 < W < 1$, a $C_{\text{máx}}$ é igual a 1 indicando o máximo emaranhamento entre o emissor e receptor. Para $W > 1$ a transferência de estado quântico está ausente.	90

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

É conhecido que em um sistema periódico puro os autoestados são estendidos. A propagação eletrônica em sistemas com algum tipo de distúrbio é um tema que ainda é bastante atual com diversas investigações teóricas e experimentais [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]. A natureza dos autoestados de um elétron é modificada quando as imperfeições da rede geram distúrbios (desordem) [9, 10, 11, 12, 13, 14]. A investigação da dinâmica de uma partícula em uma rede quântica torna-se mais empolgante com os resultados da teoria de localização de Anderson [15, 16, 17]. Em 1958, Anderson mostrou em seu artigo que sólidos desordenados têm estados eletrônicos localizados para uma faixa de energia [18, 19, 20, 21]. Também foi observado que em sistemas unidimensionais e bidimensionais, para qualquer grau de desordem não correlacionada, os estados eletrônicos são localizados exponencialmente [18, 22, 23]. Além disso, estados localizados e deslocalizados podem coexistir em diferentes faixas de energia para sistemas tridimensionais. Mas quando se trata de sistemas de baixa dimensão, nos quais a distribuição da desordem apresenta correlações intrínsecas, os autoestados podem ser deslocalizados [24, 25, 26, 27, 28]. Dessa forma, a correlação de desordem pode criar estados estendidos para alguns valores de energia. Esses estudos despertaram a atenção na investigação da existência de uma transição metal-isolante em sistemas de baixa dimensão que contém a desordem correlacionada [29, 30, 31]. Um dos trabalhos bem-sucedidos sobre o assunto, considera uma variante do modelo de Anderson com a desordem correlacionada na distribuição dos dímeros [32]. Para este modelo, a cadeia contém termos de hopping iguais e dois tipos de átomos com suas respectivas energias. Os resultados mostraram que existem estados estendidos sempre que uma das energias dos sítios aparece aos pares. Na referência [33], foi demonstrada a possibilidade de mapeamento de polianilina para um modelo de dímero aleatório. Além disso, investigações experimentais dos efeitos dessas correlações de dímeros em uma super-rede GaAs-AlGaAs (SL) também revelaram o surgimento de estados estendidos [30]. Em 1979, Abrahams e seus colegas exploraram a relação entre a transição de Anderson e a dimensionalidade do sistema por meio da teoria de escala (ver seção 2.3). A teoria de escala, fundamentada no trabalho de David J. Thouless, reformulou o modelo de Anderson de 1958 em termos de escalas, onde uma quantidade única característica, denominada condutância generalizada β , controla a transição de estados estendidos para localizados

(transição metal-isolante). Nos trabalhos de Moura e Lyra (1998) [29], Izrailev e Krokhin (1999) [31], demonstrou-se teoricamente o surgimento de uma banda de estado estendido no modelo de Anderson com correlações de longo alcance sem uma escala de comprimento característica. Vale destacar também as investigações experimentais, como aquelas realizadas em guias de onda retangulares de transmissão de micro-ondas [34], que ajudaram a provar a existência de estados estendidos em sistemas de baixa dimensão com desordem correlacionada sem escala. Alguns processos estocásticos na natureza, como a sequência de nucleotídeos de moléculas de DNA, são conhecidos por gerar sequências aleatórias correlacionadas de longo alcance [35]. Outros trabalhos [36, 37] apontaram a importância de correlações subjacentes de longo alcance para o transporte eletrônico no DNA. Em 2021, O. Narayan et al. [38] consideraram um modelo de um condutor unidimensional com desordem correlacionada, onde observaram o aparecimento de estados estendidos, e uma resistência de Landauer diferente de zero no limite de tamanho infinito contrariando as previsões da teoria de escala para localização de Anderson. Também é discutida uma possível construção de uma estrutura de deslocalização por empilhamento de filmes e um cristal fotônico unidimensional para construir um filtro de luz de banda estreita. Estudos experimentais realizados por E. Díaz [39] em filmes finos de cobre depositados sobre mica, revelaram a primeira evidência de transporte de carga envolvendo fraca localização de Anderson. Além disso, os resultados verificaram que o fenômeno de localização, esperado pela teoria quântica de resistividade de conectores metálicos nanométricos, ocorre quando os elétrons cruzam vários grãos desordenados consecutivos. Ainda em 2021, foi observada pela primeira vez pelos pesquisadores A. Mafi e J. Ballato [40], a localização transversal de Anderson em uma fibra óptica com perfil de índice de refração transversal aleatório. Essa fenomenologia promoveu o surgimento de uma nova classe de fibras ópticas não convencionais que guiam a luz, usando a localização de Anderson, na qual a luz pode guiar para qualquer lugar através do perfil cruzado aleatório. Este tipo de fibra é usado para transportar imagens endoscópicas de alta qualidade com bastante sucesso.

Em quase-cristais ou sistemas aperiódicos existem diversas investigações teóricas e experimentais [41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48]. Das Sarma foi o primeiro a demonstrar que potências determinísticas de “variação lenta” promovem o surgimento de estados estendidos [12, 49, 50]. A concepção de “variação lenta” sugere que esses potenciais mudam gradual-

mente ao longo da dimensão unidimensional, em vez de apresentarem flutuações abruptas. Ele e colaboradores consideraram inicialmente um modelo unidimensional (1D) no qual a energia potencial no sítio n é proporcional a $\cos(\pi\alpha n^\nu)$. Na variante mais famosa do modelo de Das Sarma, $\pi\alpha$ é um número racional e $\nu > 0$. Este parâmetro ν caracteriza a aleatoriedade ou a periodicidade dos potenciais on-site. Para $0 < \nu < 1$, o potencial diagonal é aperiódico; para $\nu > 1$, os termos on-sites exibem uma estrutura pseudo-aleatória. Após uma ampla coleção de métodos distintos, foi demonstrado que sempre que o potencial diagonal é limitado em uma região finita $[-V, V]$ com $V < 2$, o modelo aperiódico contém estados estendidos no limite de $0 < \nu < 1$ [49, 50]. Ressaltando que o tipo de aperiodicidade introduzida por Das Sarma e colaboradores foram tratadas no limite de forte aperiodicidade ($\nu > 1$, também chamado de limite pseudo-aleatório) e no caso quase-periódico ($\nu < 1$). O caso $\nu = 1$, representa o limite de Aubry-André. Portanto, a fonte aperiódica usada por Das Sarma revela um esquema numérico útil que ajuda na investigação de uma ampla gama de aperiodicidades. Os resultados encontrados por Das Sarma e colaboradores, como a existência de *mobilidade de edge* em cadeias não cristalinas, estimulou outros pesquisadores a entender o papel desempenhado pela aperiodicidade em diferentes domínios da ciência. No ano de 2017, X. Xiao et al. [43] estudaram um sistema de rede bicromática 1D mutuamente incomensurável. Este tipo de sistema pode ser implementado experimentalmente usando a estrutura de átomos ultra-frios. Os resultados mostram a existência de uma transição de localização-deslocalização com *mobilidade de edge* que separam estados localizados de estados estendidos. Outro sistema, como uma rede óptica quase-periódica bicromática, foi investigado experimentalmente na referência [42]. Os autores encontraram evidências experimentais da existência de uma *mobilidade de edge* de partícula única neste sistema. Em 2019, X. Deng e colaboradores [45] investigaram um modelo aperiódico padrão de Aubry-André com hopping do tipo lei de potência (r^{-a}). Para $a > 1$, o modelo é caracterizado por uma hierarquia de regimes com mobilidade de edge. Para $a \leq 1$, todos os estados permanecem deslocalizados. Mais recentemente, o modelo Aubry-André e suas generalizações, bem como o modelo Soukoulis-Economou foram amplamente investigados na referência [47]. Os resultados mostraram que a aperiodicidade desempenha um papel relevante no contexto das mobilidade de edges e também da fase intermediária de partícula única. Em linhas gerais,

os aspectos de localização dentro de sistemas aperiódicos têm sido investigados tanto teórica quanto experimentalmente. Os principais resultados sugerem que a aperiodicidade promove o aparecimento de estados estendidos e o aumento da condutância [47, 51].

Em nosso trabalho também investigamos a transferência de estados quânticos (QST)¹ em um canal com desordem conectados por um emissor e um receptor. A partir das medidas do grau de localização apresentadas no Capítulo 2, podemos avaliar as propriedades de localização ou deslocalização do canal proposto para QST. Nos últimos anos, pesquisas teóricas e experimentais sobre processamento de informação quântica vem cada vez mais se tornando um campo na ciência muito ativo, com o objetivo de superar o poder de processamento clássico convencional. Essa tarefa requer o desenvolvimento de dispositivos quânticos e a implementação de um protocolo de transferência de estados quânticos (QST) que seja capaz de transferir um estado quântico de um local para outro [52, 53]. Em geral, os protocolos de comunicação se baseiam em fótons por causa da sua fraca interação com o meio externo (ambiente) e o avanço existente na tecnologia atual de fibra óptica, mas nem sempre é possível o uso de fótons para realizar a comunicação, pois ao lidar com processadores quânticos, não é fácil converter um *qubit* estacionário em um “*flying qubit*” e vice-versa [54]. No contexto da comunicação quântica, precisamos converter ou emaranhar qubits estacionários e “*flying qubits*”. Os qubits estacionários são aqueles qubits que estão localizados em um local específico e são carregados nas memórias quânticas, como por exemplo nos nós da rede quântica. Eles realmente não se movem durante a execução de operações quânticas, por isso chamamos de estacionários. Os “*flying qubits*” são aqueles usados para criar emaranhamento em nível de link (ponta a ponta) entre as memórias quânticas estacionárias. Este tipo de qubit possui mobilidade, o que significa que pode ser transferido entre diferentes locais em um sistema quântico e/ou utilizado para transmissão quântica de informação em redes quânticas. As cadeias de spins são bastante utilizadas para realização de protocolos de QST com boa fidelidade [2, 55, 56]. Em 2003, S. Bose [1] foi um dos pioneiros a propor o uso de uma cadeia de spins para serem usados como um tipo de canal para realizar a transferência de estados quânticos por meio da dinâmica sob um hamiltoniano adequado para a comunicação em curtas distâncias [57, 58]. No entanto, os resultados mostraram que a complexidade da dinâmica

¹Sigla em inglês para *Quantum State Transfer*.

do sistema aumenta à medida que seu tamanho também aumenta, quando o acoplamento entre os spins ocorre de maneira natural [1, 2, 58]. Outros trabalhos mostraram que uma solução era projetar os acoplamentos da cadeia de spins de modo que sua dinâmica alcance a transferência de estados quânticos perfeitas e a geração de emaranhamento, independentemente do tamanho do sistema [59, 58]. Outros autores sugeriram uma maneira simples de obter uma QST perfeita ou quase perfeita em cadeia de spins finita com uma interação de longo-alcance. Basicamente, é criar um esquema de otimização para aproximar do comportamento ideal, que mantenha a força de interação ainda razoavelmente alta, onde o emissor e receptor é destacado do resto da cadeia [54, 60, 61]. Tal procedimento é escalonável com o tamanho do sistema. Os resultados mostraram que a fidelidade se torna invariante sob a escala do sistema e o tempo de transferência é independente do número de spins e ambas se aproximam dos valores ideais [54, 60]. Existe um grande esforço em pesquisas na comunidade científica para investigar novos protocolos que aumentem a qualidade de QST [60]. É de grande interesse compreender de maneira geral o papel desempenhado pela desordem nos protocolos de QST. Um dos trabalhos mostram que a desordem correlacionada melhora a transmissão de forma bastante significativa quando comparada com desordem não-correlacionada, desde que o grau de correlação seja suficientemente forte, em contrapartida os tempos de transferências são longos [61, 55]. Em geral, a maioria dos trabalhos nessa direção mostrou que alguns protocolos de comunicação são robustos contra desordens, desde que o distúrbio não ultrapasse um limite específico [61, 62].

No Capítulo 2, apresentamos uma revisão teórica sobre rede cristalina, rede de Bravais, rede Recíproca e o teorema de Bloch. Também revisitamos o modelo de Anderson e o efeito de desordem em sistemas de baixa dimensionalidade, mostramos as previsões da teoria de escala para este tipo de sistema. Para fazer uma descrição quantitativa da natureza dos estados estendidos e localizados descrevemos algumas quantidades físicas que mensuram o grau de localização ou deslocalização da função de onda. Além disso, investigamos o efeito de um campo elétrico estático em uma rede unidimensional e contrapomos com a abordagem semi-clássica padrão. Por fim, apresentamos uma breve introdução à Computação Quântica: *bits* e *qubits*, emaranhamento. Revisitamos de maneira sucinta o modelo proposto por S. Bose [1] e os conceitos de fidelidade e concorrência.

No Capítulo 3, investigamos um modelo bidimensional (2D) onde os termos de hopping seguem uma distribuição aperiódica e sob a ação de um campo elétrico estático. O formalismo de Taylor foi utilizado para obter a dinâmica do sistema. Os resultados numéricos são apresentados, primeiramente para caso sem ação do campo elétrico estático e depois para caso sob ação do campo elétrico. Os resultados são comparados com os resultados obtidos na abordagem semi-clássica.

No Capítulo 4, estudamos um modelo bidimensional (2D) com termos de hopping que seguem uma distribuição de desordem correlacionada e sob o efeito de um campo elétrico externo. O método de Taylor também foi usado para obter a dinâmica do sistema. Investigamos primeiramente para caso sem ação do campo elétrico e depois para caso sob ação do campo elétrico. Discutimos os resultados e comparamos com os resultados previstos pela abordagem semi-clássica.

No Capítulo 5, investigamos a transferência de estados quânticos ao longo de um canal do tipo diamante com desordem na diagonal. Consideramos, um canal fracamente acoplado a um emissor e um receptor. Utilizamos o método de diagonalização exata do hamiltoniano para obter os resultados.

No Capítulo 6, apresentamos as considerações finais, sugestões de variações do nosso modelo e propostas futuras de trabalho, que seguem o desenvolvimento das mesmas linhas de pesquisa abordadas nesta Tese.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Rede Cristalina e o Teorema de Bloch

Uma estrutura cristalina se caracteriza por uma repetição espacial regular e periódica de uma estrutura base que pode conter um ou mais átomos ligados entre si [63]. A célula de menor volume possível desta estrutura é chamada de *célula primitiva*. Várias células primitivas arranjadas periodicamente são capazes de preencher todo o volume do cristal, dando origem à periodicidade da rede cristalina [64]. A consequência desta periodicidade é a invariância da rede para translações sobre distâncias que sejam múltiplos inteiros do período da rede. Isto, só se torna verdade para um cristal ideal infinito ou um cristal finito submetido a condições periódicas de contorno.

Uma *rede de Bravais* é um arranjo infinito de pontos discretos dispostos regularmente no espaço, de forma que qualquer ponto desta rede pode ser localizado por um vetor \mathbf{R} [63, 65], tal que

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad , \quad (2.1)$$

onde n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros e \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são conhecidos como *vetores primitivos*, vetores que se estende sobre a rede a partir de uma célula básica [63, 65]. Perceba que uma rede de Bravais é um conceito puramente matemático, pelo fato de possuir dimensão infinita e que qualquer de seus pontos é equivalente a qualquer outro da rede [63].

A *rede recíproca* relacionada a uma dada rede cristalina é aquela que é formada por um conjunto de vetores de onda \mathbf{K} que satisfaz a relação [63]:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1 \quad (2.2)$$

para todo vetor \mathbf{R} da rede de Bravais. Esta definição também engloba as propriedades de periodicidade da rede de Bravais. Considere a onda plana $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ onde deve se refletir a periodicidade da rede de Bravais, ou seja,

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} \quad . \quad (2.3)$$

Logo, esta igualdade será verdadeira apenas se a relação (2.2) for satisfeita. A rede recíproca também é uma rede de Bravais gerada por três vetores primitivos \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 e \mathbf{b}_3 , expresso por

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.4a)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.4b)$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (2.4c)$$

onde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são os vetores primitivos da *rede direta*¹. Note que $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ é o volume da célula unitária na rede direta. Os \mathbf{b} 's estão relacionados com os \mathbf{a} 's conforme a seguinte relação

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (2.5)$$

A rede recíproca é dada pelo conjunto de pontos que são descritos pelos vetores

$$\mathbf{K} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3, \quad (2.6)$$

onde os m 's são números inteiros. Então, de acordo com as equações (2.1), (2.6) e a relação (2.5), temos que

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(m_1n_1 + m_2n_2 + m_3n_3). \quad (2.7)$$

Para que $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$ seja unitário para todo \mathbf{R} , a equação (2.7) deve ser igual a 2π vezes um número inteiro, para quaisquer escolhas dos números inteiros n 's. Isto exige que os coeficientes m 's sejam números inteiros. Então, a condição (2.1) para que \mathbf{K} seja um vetor da rede recíproca é satisfeita pelos vetores que são combinações lineares (2.6) dos \mathbf{b} 's com coeficientes inteiros [65]. Portanto, a rede recíproca é uma rede de Bravais e os \mathbf{b} 's podem ser tomados como vetores primitivos.

¹Rede de Bravais no espaço real.

É importante ressaltar que a periodicidade da rede recíproca possui importantes resultados para análise de problemas que envolvem elétrons de condução em cristais [63]. Como exemplo, considere duas funções de onda, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})$, no qual \mathbf{K} é um vetor da rede recíproca. Como a rede recíproca é também uma rede de Bravais, portanto, possui simetria de translação, as duas funções de onda podem diferir no máximo por um fator de fase global [63], ou seja,

$$|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = |\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})|^2. \quad (2.8)$$

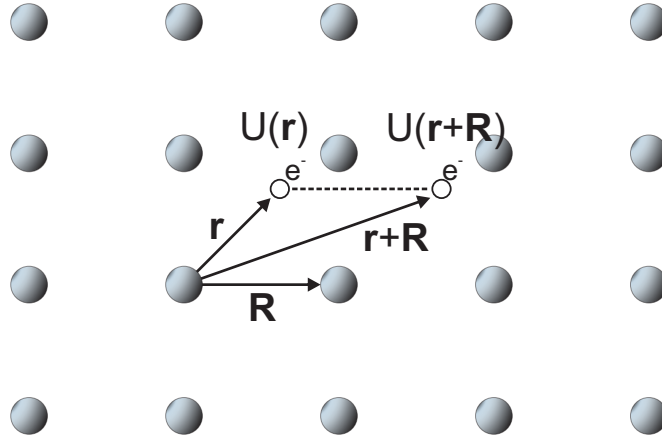
Portanto, todos os valores de \mathbf{k} que são fisicamente distinguíveis pertencem a uma única célula unitária da rede recíproca.

O modelo proposto pelo físico suíço Felix Bloch foi fundamental na descrição do movimento de elétrons de condução em sólidos. Em princípio, o problema de elétrons em sólidos é por natureza um problema de muitos corpos (muito elétrons), pois o hamiltoniano completo do sólido não possui somente o potencial de interação dos elétrons com os íons da rede, mas também contém os termos de interação elétron-elétron [65]. No modelo de Bloch, é utilizada uma aproximação de elétrons independentes, ou seja, as interações elétron-elétron são desprezadas, restando apenas as interações dos elétrons com os íons da rede, representadas por um potencial efetivo $U(\mathbf{r})$ [63, 65]. O fato que os íons em um cristal perfeito são ordenados em um arranjo periódico e regular, implica uma periodicidade espacial do potencial $U(\mathbf{r})$. Portanto, se \mathbf{R} é um vetor da rede de Bravais, como mostra a Figura 2.1, o potencial que atua sobre o elétron na posição \mathbf{r} terá a propriedade:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

Já é conhecido que os autoestados de um elétron que se movem em um cristal são dados pelas soluções da equação de Schrödinger independente do tempo. Logo, a equação a ser resolvida é dada por

Figura 2.1: A periodicidade espacial do potencial U vem da periodicidade da rede. \mathbf{R} é um vetor da rede que localiza os íons e \mathbf{r} é o vetor que localiza o elétron.



Fonte: Adaptado de [63].

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi = E\psi. \quad (2.10)$$

Como todos os pontos de uma rede de Bravais são equivalentes, às funções de onda que são soluções de (2.123) em \mathbf{r} e $\mathbf{r} + \mathbf{R}$ são $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, respectivamente, e obedecem à seguinte relação

$$|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})|^2 = |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2, \quad (2.11)$$

ou seja, essas duas funções têm o mesmo autovalor de energia E e só diferem por um fator de fase global λ . Deste modo, considerando uma rede unidimensional formada por N íons em um anel de comprimento Na , cuja a energia potencial é periódica em a ($U(x) = U(x + na)$), onde a é um inteiro [64], devemos ter

$$\psi(x + Na) = \lambda^N \psi(x). \quad (2.12)$$

Normalizando o fator de fase global ($|\lambda|^2 = 1$) em (2.12), obtemos

$$\lambda^N = 1, \quad (2.13)$$

que é satisfeita considerando

$$\lambda = \exp\left(\frac{i2\pi n}{N}\right), \quad (2.14)$$

onde n é um número inteiro entre 0 e $N - 1$. Portanto, a função de onda em um potencial cujo período é a , é expressa como

$$\psi(x) = u_k(x) \exp\left(\frac{i2\pi nx}{Na}\right), \quad (2.15)$$

onde $u_k(x)$ é uma função periódica em a , de modo que $u_k(x) = u_k(x + a)$.

De maneira análoga ao caso unidimensional, para um vetor da rede \mathbf{R} que localiza os íons, a função $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é em geral escrita da seguinte maneira

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.16)$$

onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ também possui a periodicidade da rede, ou seja, $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. A partir da expressão matemática (2.16), F. Bloch apresenta seu teorema [64]:

Teorema 1 (Teorema de Bloch). *As autofunções da equação de onda para uma partícula submetida a um potencial periódico são o produto de uma onda plana $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ por uma função $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ com a periodicidade da rede cristalina.*

A função de onda de um elétron (2.16) é conhecida como *função de Bloch* e os elétrons que são descritos pela mesma são chamados de *elétrons de Bloch* (em contraste com a função de *elétrons livres*) [65]. A partir do modelo de Bloch, vários pontos na área da física foram descobertos e assimilados. Os principais pontos são: que a função de onda de um elétron se estende por todo sistema; a diferença entre materiais condutores, isolantes e semicondutores através do surgimento de uma estrutura de bandas de energia nesses materiais.

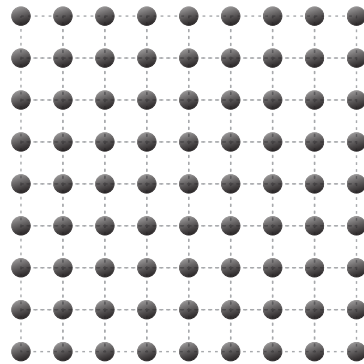
Como não existe na natureza estruturas cristalinas perfeitas, pois até mesmo os sólidos cristalinos produzidos em laboratório possuem algum tipo de imperfeição que são responsáveis por alterações na condução elétrica dos sólidos, outros novos modelos que levam em consideração essas características surgiram para compreender melhor os efeitos de desordem nos sólidos [66, 67]. Um sistema é desordenado quando apresenta várias imperfeições em sua estrutura cristalina. Como exemplo, apresentamos o modelo de Anderson na seção 2.1.

2.2 Modelo de Anderson

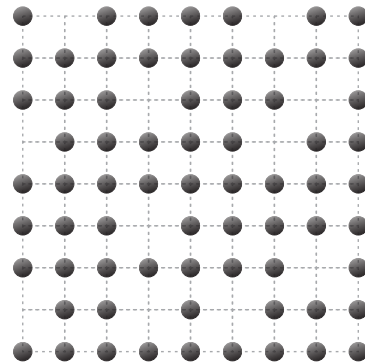
A maioria dos estudos teóricos em sólidos eram baseados em sistemas com invariância translacional, ou seja, sistemas sem desordem, onde são descritos por funções de ondas que se estendem por todo sistema [68]. Por outro lado, praticamente todos os sólidos encontrados na natureza ou produzidos em laboratório, apresentam algum tipo de defeito que destroem a invariância translacional e alteram a condução eletrônica [67, 69]. Esses tipos de defeitos (ou imperfeições) são conhecidos como *desordem* e são caracterizadas por irregularidades espaciais e/ou imperfeições composicionais [67], como é mostrado na Figura 2.2.

A presença de desordem e a interação elétron-elétron influenciam no comportamento do pacote de onda eletrônico [67]. Estes dois elementos podem causar um comportamento típico de um isolante, no qual a função de onda eletrônica é localizada em uma região finita da rede. A partir disso, podemos dizer que existe outros dois tipos de isolantes, o primeiro é conhecido como *isolante de Anderson* que está relacionado com os efeitos da distribuição dos íons na rede, o outro é o *isolante de Mott* que leva em conta à interação Coulombiana elétron-elétron [67].

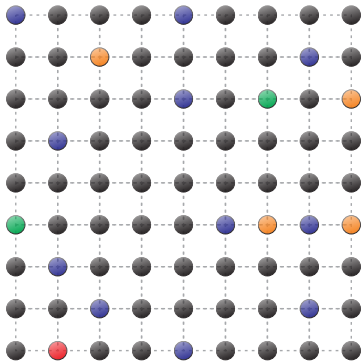
Figura 2.2: Representação de uma rede quadrada 2D cristalina perfeita e com diferentes tipos de desordem.



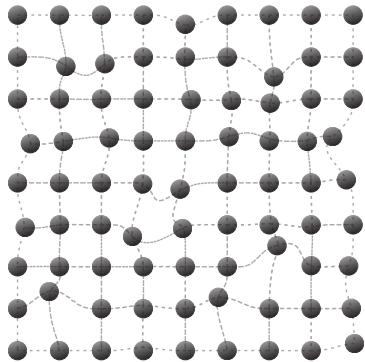
(a) Rede Cristalina perfeita.



(b) Rede com desordem composicional do tipo lacunas ou vacância.



(c) Rede com desordem composicional de diferentes átomos distribuídos aleatoriamente.



(d) Rede com deslocamento (desordem estrutural).

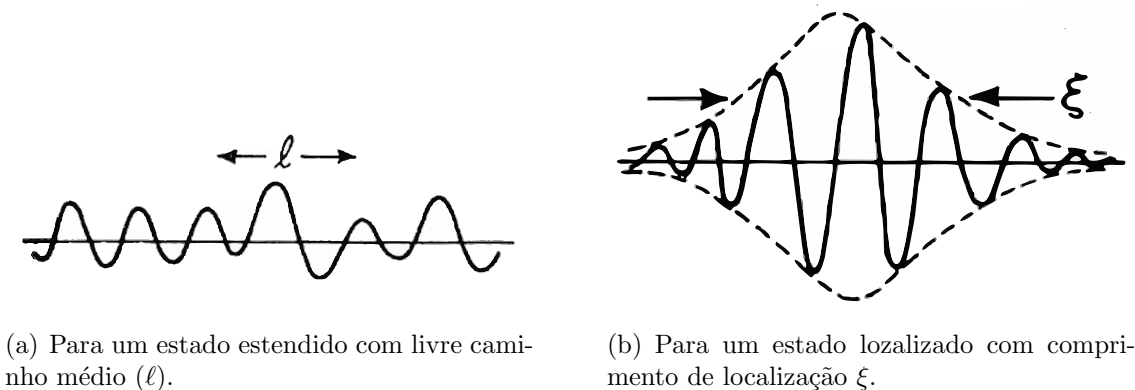
Fonte: Adaptado de [67].

Considerando um modelo com potencial nulo $U(\mathbf{r} = 0)$ (“elétrons livres”), onde as funções de onda se estendem por todo sistema. Quando é inserido uma barreira potencial nesse sistema, a função de onda do elétron será parcialmente transmitida e a outra parte refletida pela barreira. Em vez de uma única barreira, são introduzidas várias barreiras que provocam múltiplas transmissões e reflexões nas funções de onda e podem gerar interferências construtivas e destrutivas dependendo da diferença de fase entre elas [66]. Essa diferença de fase é afetada pela intensidade das barreiras de potencial e/ou pelo espaçamento entre elas.

Vamos considerar dois casos, o primeiro quando as barreiras de potencial possuem a

mesma intensidade e são igualmente dispostas, ou seja, com potencial periódico (modelo de Bloch). Logo, as interferências serão construtivas e as funções de onda estendidas. O segundo caso, quando o potencial é aleatório e representam as barreiras de potencial posicionadas aleatoriamente ou com intensidades aleatórias, causa na função de onda várias reflexões que resulta em uma incoerência de fase [66, 67, 69, 16]. Para um grau de desordem fraco, a função de onda eletrônica permanece estendida, mas sem coerência de fase e o comprimento de coerência é dado pelo livre caminho médio (ℓ), como mostra a Figura 2.3(a). Este regime é conhecido como fase metálica. Quando o grau de desordem é forte, as reflexões da função de onda eletrônica geram interferências destrutivas o que resulta em uma localização da função de onda, ou seja, a função de onda se localiza em uma região finita da rede e apresentam valor desprezível em qualquer outra região, como mostra a Figura 2.3(b). Este regime é conhecido como fase isolante [66, 67, 69, 16]. Logo, a probabilidade de encontrar o elétron decai exponencialmente de algum ponto \mathbf{r}_0 no espaço, ou seja, $|\psi(\mathbf{r})| \propto \exp\{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\xi\}$ e ξ é comprimento de localização, que mede a largura do pacote de onda [16], como mostra a Figura 2.3(b).

Figura 2.3: Representação da função de onda típica.



Fonte: Retirado de [16].

Para um grau de desordem intermediário, podemos observar no sistema uma transição conhecida como *transição metal-isolante* ou *transição de Anderson*.

No ano de 1958, Philip Warren Anderson em seu artigo propôs um modelo que leva em conta os efeitos de desordem sobre a função de onda eletrônica. O modelo de Anderson

despreza a interação Coulombiana e descreve que o movimento do elétron ocorre através de “saltos” quânticos entre os sítios vizinhos (termo cinético) e ainda existe um termo potencial aleatório que representa a energia de cada sítio da rede [66, 67, 69, 68, 18]. Para o modelo de Anderson o hamiltoniano na representação de Wannier (tight-binding) é dado por [68]

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} J_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (2.17)$$

onde ϵ_i é a energia potencial aleatória no sítio i e J_{ij} é energia cinética quando elétron “salta” do sítio i para j , também conhecido como *amplitude de hopping* ou *integral de transferência*. O estado $|i\rangle$ representa o orbital atômico centrado no sítio i e o conjunto de orbitais atômicos $\{|i\rangle\}$ são ortogonais entre si e formam uma base em que os autoestados do hamiltoniano (2.17) podem ser expandidos [68]. As energias ϵ_i são distribuídas aleatoriamente num intervalo de largura W , onde o parâmetro W é conhecido como *largura de desordem*.

Para obter os autoestados e autovalores eletrônicos do hamiltoniano (2.17), devemos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo com um termo potencial aleatório, ou seja,

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.18)$$

Usando a expansão dos autoestados nas bases de orbitais atômicos ($|\psi\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$) na equação (2.18), obtemos

$$E f_n = \epsilon_i f_n + \sum_j J_{ij} f_j. \quad (2.19)$$

Para compreender a natureza dos estados eletrônicos, vamos investigar a equação (2.19) a partir de dois casos limites. O primeiro caso, quando os potenciais são distribuídos sobre uma rede regular e todos os termos de hopping possuem magnitudes iguais ($J_{ij} = J$) entre os z primeiros vizinhos. Dessa forma, a equação (2.19) se torna

$$Ef_n = \epsilon_i f_n + J \sum_{j=1}^{j=z} f_{n+j}, \quad (2.20)$$

onde J é o termo de hopping (ou integral de transferência) entre todos os pares de sítios vizinhos da rede, J e W são tomados como unidade de energia [68]. O problema em que não existe desordem (caso cristalino), ou seja, $W = 0$ pode ser resolvido como caso limite da equação (2.20), onde as energias ϵ_i são todas iguais, por conveniência fizemos $\epsilon_i = 0$ para todo i . Portanto, para uma cadeia linear, obtemos

$$Ef_n = J(f_{n-1} + f_{n+1}). \quad (2.21)$$

Uma solução que satisfaz é do tipo exponencial complexa, portanto, escolhendo $f_n = f_0 e^{ink}$ a equação (2.21) é satisfeita e obtemos

$$E(k) = 2J \cos(k), \quad (2.22)$$

o que corresponde à banda cristalina da teoria de Bloch com estados estendidos com energias compreendidas entre $-2J < E < +2J$. Para os casos de cadeias unidimensionais com $z = 2$, a largura da banda cristalina de energia permitida é $B = 4J$. Em geral, a largura da banda cristalina para um sistema de dimensão (D) é dada por $B = 2zJ$, onde z é o número de vizinhos. Outro caso limite é quando $W \neq 0$ e $J = 0$ (sem acoplamento), resultando como solução do problema os orbitais atômicos (estados localizados) [69, 68].

Os problemas em que J e W são não nulos (não triviais) foram amplamente estudados por Anderson e pela comunidade científica. O modelo de Anderson 3D, mostrou uma transição metal-isolante em W_c , onde W_c é o valor crítico de desordem em que o sistema passa para o regime metálico para $W < W_c$. A princípio, a condição de transição metal-isolante não tinha sido verificada em sistemas de baixa dimensionalidade, pois os efeitos de desordem são fortes para estes sistemas, portanto, todos os estados eletrônicos seriam exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem. Em 1979, Abrahams e colaboradores estudaram a dependência da transição de Anderson com a dimensionalidade do sistema através da *teoria de escala* (ver seção 2.3).

2.3 Teoria de Escala para a Transição de Anderson

No ano de 1979, Abrahams, Licciardello e Ramakrishnan apresentaram um trabalho [22] usando a teoria de escala para a condutância generalizada do modelo de Anderson no qual se observou uma dependência da transição de Anderson com a dimensão D do sistema [66, 69, 22]. A teoria de escala se baseia no trabalho de David J. Thouless que reformulou o modelo de Anderson de 1958 em termos de escalas, onde uma única quantidade característica, chamada de *condutância generalizada* g , controla a transição de estados estendidos para localizados (transição metal-isolante) em temperatura zero ($T = 0$).

De acordo com a abordagem de Thouless, as unidades básicas deixam de ser sítios atômicos i do modelo de Anderson e passam a ser caixas (blocos) de volume l^D que contêm muito sítios, onde D é a dimensão e l é a largura da caixa [66, 69, 68]. Logo, o sólido é descrito por um hipercubo formado por várias caixas acopladas umas às outras. As energias estudadas no modelo de Anderson W (desordem) e J (acoplamento) são mapeadas em outras duas grandezas, no espaçamento médio ΔE entre os níveis e no deslocamento δE provocado por mudanças nas condições de contorno, respectivamente. No limite macroscópico é possível determinar a dependência da condutividade com δE e a partir do princípio da incerteza Heisenberg [69], podemos escrever

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_{\mathcal{D}}}, \quad (2.23)$$

onde $t_{\mathcal{D}}$ é o tempo necessário para que o pacote de onda eletrônico seja difundido até as bordas de uma caixa de lado L . Quando consideramos que o elétron executa um movimento Browniano dentro de uma caixa, o tempo de difusão $t_{\mathcal{D}}$ é dado por

$$t_{\mathcal{D}} = \frac{L^2}{\mathcal{D}}, \quad (2.24)$$

onde \mathcal{D} é a constante de difusão. Utilizando a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão, obtemos

$$\sigma = e^2 n(E) \mathcal{D}, \quad (2.25)$$

onde σ é a condutividade, e é carga do elétron e $n(E)$ a densidade média de estados. Substituindo as equações (2.24) e (2.25) em (2.23), obtemos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 [L^D n(E)]}. \quad (2.26)$$

A densidade média de estados pode ser expressa como função do espaçamento médio entre os níveis [69], ou seja,

$$n(E) = \frac{1}{L^D \Delta E}. \quad (2.27)$$

Adotando a razão $\Delta E/\delta E$ como uma medida de “força” de desordem no sistema, de forma análoga a razão W/J no modelo de Anderson. Deste modo, os estados eletrônicos estendidos são sensíveis à mudança na condução de contorno, isto é, $\delta E > \Delta E$. Já os estados localizados não são sensíveis às mesmas alterações nas condições de contorno, isto é, $\delta E < \Delta E$ [69]. Na teoria de escala, o parâmetro de desordem g^{-1} é definido como

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (2.28)$$

Substituindo as equações (2.26) e (2.27) em (2.28), obtemos

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{D-2}, \quad (2.29)$$

onde pode-se notar a dependência de escala do parâmetro g . A equação (2.29) se aplica a estados estendidos apenas no limite macroscópico e o termo $L^{D-2} \sigma$ é a condutância de um hipercubo com D-dimensão de lado L e condutividade σ . Dessa forma, a função $g(L)$ pode ser entendida como uma condutância generalizada em unidade de e^2/\hbar [66, 67, 69, 68].

Considerando g_0 como a condutância generalizada para um sistema formado por caixas acopladas de volume L_0^D . Dessa maneira, g_0 é escrito como

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)}. \quad (2.30)$$

Portanto, na teoria de escala a partir de uma condutância generalizada g_0 em uma escala de comprimento inicial L_0 é possível obter uma condutância generalizada g em uma escala maior $L = bL_0$, onde b é um fator de escala [69]. Tratando o fator b como uma transformação contínua, o comportamento de escala da função g na nova escala é determinado por uma função $\beta(g)$ dada por [66, 69]

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (2.31)$$

Para entendermos o comportamento de $\beta(g)$ é analisado a equação (2.31). Portanto, quando β é positivo ($\beta > 0$), g cresce com o crescimento do comprimento de L , caracterizando um comportamento metálico [66, 69]. Já quando β é negativo ($\beta < 0$), g decresce com o aumento do comprimento L , caracterizando um comportamento isolante [66, 69].

A Figura 2.4, mostra o comportamento qualitativo da função de escala $\beta(g)$ para as dimensões $D = 1, 2$ e 3 [22]. O comportamento qualitativo é determinado através do estudo da função $\beta(g)$ nos seus limites assintóticos, ou seja, $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$. Para g suficientemente grande ($g \rightarrow \infty$), ou seja, no limite em que o acoplamento é forte e o grau de desordem é baixo, a condutância generalizada é dada pela teoria macroscópica de Thouless [67], de maneira que usando as funções (2.29) e (2.31), obtemos

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = D - 2. \quad (2.32)$$

Logo, a função de escala tende para os valores a seguir

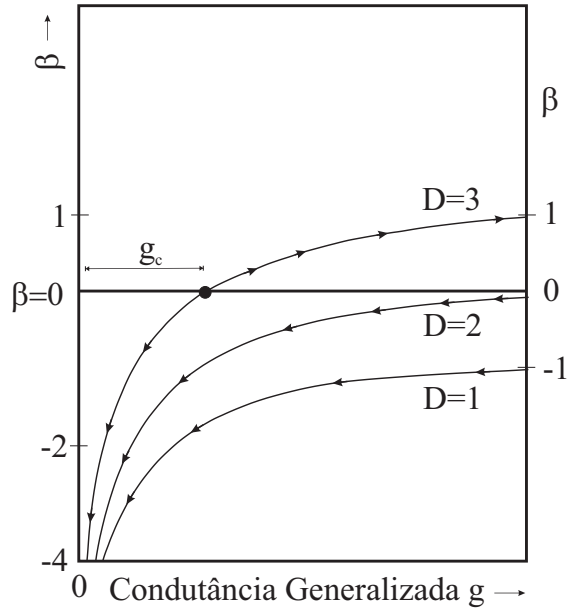
$$\beta(g \rightarrow \infty) = \begin{cases} +1 & , \text{ para } D = 3 \\ 0 & , \text{ para } D = 2 \\ -1 & , \text{ para } D = 1 , \end{cases} \quad (2.33)$$

$$(2.34)$$

$$(2.35)$$

conforme a Figura 2.4. Para g pequeno ($g \rightarrow 0$), isto é, um limite de fraco acoplamento

Figura 2.4: Representação do comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ em função da condutância g , para as dimensões $D = 1, 2$ e 3 .



Fonte: Adaptado de [22].

e forte desordem, o modelo de Anderson indica que os estados sejam localizados e decaem exponencialmente com a distância [69]. Nas bordas de uma caixa de dimensão linear L , o pacote da função de onda de um elétron localizado dentro de uma caixa é da ordem de $e^{-\gamma L}$, onde γ é chamado de expoente de *Lyapunov* ou *inverso do comprimento de localização*. Consequentemente, o acoplamento entre caixas também decai exponencialmente com L , de modo que,

$$g(L) \propto e^{-\gamma L}. \quad (2.36)$$

Utilizando a equação (2.31), para obter

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) \approx \ln g, \quad (2.37)$$

quando a condutância generalizada g tende a zero, a função $\beta(g)$ tende a $-\infty$, independente da dimensão do sistema, como também mostra a Figura 2.4. O diagrama de fluxo na Figura

2.4, mostram a direção em que g varia quando L cresce. Para $D = 1$ e $D = 2$, as setas indicam que g sempre diminui quando L cresce, ou seja, a teoria de escala propõe que os estados no modelo de Anderson para $D \leq 2$, são localizados independente do grau de desordem [69]. Para $D = 3$, existem dois comportamentos distintos separados por um certo ponto g_c quando $\beta(g) = 0$, chamado de *ponto fixo instável*. Portanto, abaixo do ponto g_c ($\beta(g) < 0$) as setas do diagrama de fluxo indicam que a condutância generalizada g diminui quando L cresce, caracterizando um comportamento isolante; acima do ponto g_c ($\beta(g) > 0$) a condutância generalizada g cresce quando L também cresce, caracterizando um comportamento metálico [66, 67, 68, 69].

Em resumo, a teoria de escala mostra uma dependência da transição de Anderson com a dimensão do sistema, no qual para $1D$ e $2D$ não existe transição metal-isolante com a condutividade tendendo a zero quando $L \rightarrow \infty$, enquanto para um sistema $3D$ existe uma transição metal isolante [66, 67, 68, 69].

2.4 Desordem com Correlações

No modelo de Anderson foi demonstrado a existência de um tipo de transição metal-isolante devido à presença de desordem. Em seguida, Abrahams e colaboradores demonstraram por meio de uma teoria de escala o comportamento isolante para qualquer grau de desordem em sistemas $1D$ e $2D$ e a possibilidade de uma transição metal-isolante em sistemas $3D$. Porém, nas últimas décadas vários modelos surgiram no qual a desordem segue uma sequência pseudo-aleatória ou apresentam correlações que são responsáveis por um comportamento não previsto pela teoria de escala no modelo de Anderson [67, 68, 69].

Em 1998, Moura e Lyra [29] investigaram o modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo-alcance nos elementos da diagonal do Hamiltoniano, representando uma desordem apenas nos potenciais dos sítios da cadeia. As energias on-sites seguem uma sequência que descreve o traço de um movimento Browniano fracionário com uma densidade espectral do tipo lei de potência dada por $S(k) = 1/k^\alpha$, onde o parâmetro α controla o grau de correlação. Os resultados mostraram que o sistema exibe uma fase de estados estendidos

no centro da banda quando $\alpha > 2$ [68, 69, 29].

Mandelbrot [70] apresentou a ideia de movimento Browniano fracionário (MBF) como uma generalização de uma função aleatória $x(t)$. Considerando $B_{\mathcal{H}}(t)$ como a posição de uma partícula que descreve o MBF, depois de t passos [68]. O incremento médio entre t e t_0 é igual a zero, ou seja, $\langle B_{\mathcal{H}}(t) - B_{\mathcal{H}}(t_0) \rangle = 0$ e a variância dos incrementos $V(t - t_0)$ é dado por

$$V(t - t_0) = \langle [B_{\mathcal{H}}(t) - B_{\mathcal{H}}(t_0)]^2 \rangle = 2\tau\mathcal{D} \left(\frac{|t - t_0|}{\tau} \right)^{2\mathcal{H}}, \quad (2.38)$$

no qual \mathcal{D} é a constante de difusão, τ é o intervalo entre duas observações sucessivas da posição da partícula e \mathcal{H} é expoente Hurst [68]. Seja $X(t)$ uma função aleatória, o expoente de Hurst \mathcal{H} é igual a $1/2$ e no movimento Browniano fracionário o expoente \mathcal{H} é um número real dentro do intervalo $[0, 1]$. É importante ressaltar que as correlações de longo-alcance entre os passos só existem no caso de um movimento Browniano fracionário, enquanto que para movimento Browniano simples as correlações são nulas [68].

A sequência temporal aleatória $x(t_i)$ que exibe a densidade espectral do tipo lei potência [29] é obtida usando o formalismo da transformada de Fourier. Considerando que a posição da partícula seja observada no instante $t_i = i\tau$ e que tenha N valores no período $T = N\tau$. A densidade espectral do tipo lei de potência é dada por [71]

$$x_i = x(t_i) = \sum_{k=1}^{N/2} [S(\omega_k)\Delta\omega]^{1/2} \cos(\omega_k t_i + \phi_k). \quad (2.39)$$

A equação (2.39) é decomposição de Fourier discreta da sequência x_i e ω_k são múltiplos da frequência fundamental $\Delta\omega = 2\pi/T$ ($\omega_k = k\Delta\omega$). As fases ϕ_k representam uma única fonte de ruído e são distribuídas uniformemente no intervalo $[0, 2\pi]$, onde escolhermos $\tau = 1$ e $S(\omega_k) = 1/\omega_k^\alpha$. Logo, a equação para os termos da série é escrita como

$$x_i = \sum_{k=1}^{N/2} \left[k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos\left(\frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right), \quad (2.40)$$

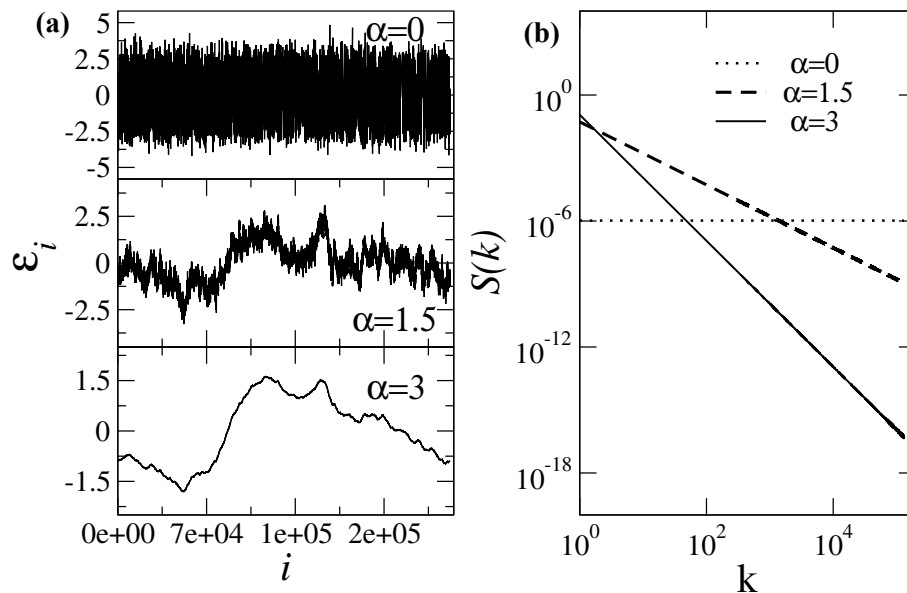
onde α é o parâmetro que controla o grau de correlações. Para $\alpha = 0$, a sequência aleatória

não possui correlação entre eventos (ruído branco). Já quando $\alpha = 2$, retomamos o movimento Browniano simples sem a presença de correlações entre os incrementos. Moura e Lyra [29] introduziram correlações de longo-alcance no modelo de Anderson, escolhendo as energias dos sítios ϵ_i geradas pela sequência aleatória dada por (2.40). Ressaltando, que de acordo com a equação (2.40) a variância dos incrementos aumenta com o tamanho da série ($\langle (x_{i+L} - x_i)^2 \rangle \propto N^{2H}$). Para obter uma distribuição de energias com invariância independente do tamanho da série é realizada uma normalização da sequência para remover a dependência das amplitudes de Fourier com o tamanho da cadeia. Portanto, as energias dos sítios ϵ_i é escrita como

$$\epsilon_i = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right), \quad (2.41)$$

onde $\mathcal{C}(\alpha)$ é uma constante escolhida de modo que tenhamos média $\langle \epsilon_i \rangle = 0$ e variância $\Delta\epsilon_i = \sqrt{\langle \epsilon_i^2 \rangle - \langle \epsilon_i \rangle^2} = 1$. As Figuras 2.5(a) e 2.5(b) mostram as energias dos sítios ϵ_i e a densidade espectral, onde observou-se um comportamento $S(k) \propto 1/k^\alpha$, para $\alpha = 0, 1.5, 3$ e $N = 2 \times 10^5$, respectivamente.

Figura 2.5: (a) Potencial com desordem correlacionada de longo-alcance com $N = 2 \times 10^5$ e $\alpha = 0, 0.5, 1.5$. (b) O comportamento da densidade espectral $S(k) \propto 1/k^\alpha$ para $\alpha = 0, 1.5$ e 3.



Fonte: Retirado de [68].

A função $S(k)$ é obtida por meio da transformada de Fourier numérica de ϵ_i , ou seja, $S(k) = (\epsilon_k)^2$ onde ϵ_k são as componentes de Fourier. Observa-se que para $\alpha = 0$, a distribuição de energia é semelhante ao modelo de Anderson sem correlação.

Moura e Lyra [29], por meio do cálculo do expoente de Lyapunov, mostraram que para $\alpha > 2$ existe uma determinada região de energia em que o coeficiente de Lyapunov é zero, sugerindo a existência de estados estendidos (metálico) próximo ao centro da banda. Para $\alpha < 2$ o coeficiente de Lyapunov é sempre diferente de zero, indicando estados localizados [66, 67]. Portanto, sugerindo que o modelo exibe uma verdadeira transição metal-isolante, mesmo em sistemas unidimensionais. No ano de 1999, os pesquisadores Izrailev e Krokhnin [31] através de uma teoria de perturbação de segunda ordem, obtiveram resultados semelhantes, ou seja, uma transição metal-isolante.

O surgimento de estados metálicos em sistemas com desordem correlacionada de longo-alcance incentivou diversas investigações teóricas e experimentais na área. Um dos estudos experimentais, foi a transmissão de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados, onde mostram uma faixa de frequências no qual os modos são transmitidos [69, 34].

Os efeitos que surgem com a competição entre os termos de interações (campo elétrico ou Coulombiana) e desordem correlacionadas são bastante investigados [68, 69]. Em sistemas cristalinos os efeitos de campos elétricos estáticos são relevantes, pois apresentam uma dinâmica coerente conhecida como *Oscilações de Bloch* [68, 72]. Por outro lado, vários trabalhos em sistemas com desordem correlacionada também exibem *Oscilações de Bloch* [68].

2.5 Medidas do Grau de Localização

É fundamental uma descrição quantitativa para descrever a natureza estendida ou localizada da função de onda, mas a caracterização não é simples do ponto de vista analítico e/ou numérico. A presença de desordem no hamiltoniano do modelo dificulta a abordagem

analítica, sobrando uma via mais realizável que é numérica, porém com limitações devido à capacidade computacional. Uma das maneiras de descrever esta natureza é resolver a equação de Schrödinger $H |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle$ e investigar os autoestados $|\Psi_i\rangle$ diretamente [68, 69].

2.5.1 Quantidades Independentes do Tempo

O primeiro método que vamos abordar é baseado na diagonalização exata do hamiltoniano do sistema. A partir da representação matricial do hamiltoniano H utilizando a base de orbitais atômicos $|n\rangle$ e em seguida a diagonalização da matriz, podemos obter os autoestados $|\Psi_i\rangle$ e suas respectivas autoenergias E_i , onde os autoestados também são escritos na base de orbitais atômicos na forma

$$|\Psi_i\rangle = \sum_{n=1}^N f_n^{(i)} |n\rangle. \quad (2.42)$$

Um das quantidades que mede o grau de localização dos estados $|\Psi_i\rangle$ é chamada de *razão de participação*, definida como

$$\xi = \frac{\sum_j |f_n|^2}{\sum_j |f_n|^4}. \quad (2.43)$$

Para entender como a razão de participação está associada com o grau de localização, é necessário analisar o caso de uma cadeia pura, onde os autoestados são todos estendidos com as amplitudes de ondas f_n constantes. Para manter a normalização dos autoestados o numerador da equação (2.43) deve ser igual a 1 e a probabilidade de encontrar o elétron é igual em toda a cadeia, ou seja,

$$\begin{aligned} \sum_n |f_n|^2 = 1 &\Rightarrow N|f_n|^2 = 1 \\ |f_n| &= \frac{1}{\sqrt{N}}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Desta forma, a razão de participação torna-se

$$\xi = \frac{1}{\sum_n |f_n|^4} = \frac{1}{\sum_n \frac{1}{N^2}} = N, \quad (2.45)$$

Logo, ξ representa o número de sítios no qual as amplitudes da função de ondas são não-nulas ($f_n \neq 0$), ou seja, o número sítios em que a função de onda está distribuída. Para um sistema estendido todos os sítios contribuem para a função de onda [69, 68]. Para um caso mais geral, em um sistema com dimensão D, a participação para estados estendidos diverge da seguinte forma $\xi \propto N^D$ [68]. Em funções de ondas localizadas em uma determinada região do espaço, ξ é finito no limite termodinâmico [69, 73].

Outra quantidade física que pode ser obtida por meio do hamiltoniano é a *entropia de Shannon* [73, 74], definida como

$$S = - \sum_n |f_n|^2 \log(|f_n|^2). \quad (2.46)$$

Esta equação (2.46) possui um comportamento parecido com o descrito para participação, porém, em uma escala logarítmica. Quando $S = 0$, o sistema é localizado, enquanto que para $S = \log(N^D)$ o estado é perfeitamente estendido (deslocalizado) para um sistema de dimensão D [68, 74].

O *desvio médio quadrático* σ é outra medida importante a respeito da topologia do pacote de onda [68], definido como

$$\sigma = \sqrt{\sum_n (n - \langle n \rangle)^2 |f_n|^2}, \quad (2.47)$$

onde $\langle n \rangle = \sum_n n |f_n|^2$ é a posição média do pacote de onda. Ressaltamos, que as quantidades ξ , S e σ são medidas do tamanho do pacote de onda, uma investigação de escala destas quantidades nos indica se o estado é localizado ou estendido. Como exemplo, em um sistema 1D para um dado estado metálico, a participação ξ e o desvio médio quadrático σ , diverge linearmente com N , logo, as quantidades ξ/N e σ/N são independentes de N .

Outra maneira que permite medir o grau de localização é através do cálculo do *comprimento de localização* λ , que é definido a partir do comportamento assintótico da função de onda [68, 69, 73]. Para grandes distâncias, a função de onda exhibe um decaimento exponencial:

$$\Psi_i(r) = \psi(r) \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right), \quad (2.48)$$

onde r é a distância ao centro da localização. Para estados estendidos o comprimento de localização λ tende a infinito ($\lambda \rightarrow \infty$) [69, 75, 8]. Enfatizamos que o expoente de Lyapunov é definido como o inverso do comprimento de localização, $\gamma = 1/\lambda$. Dentre os métodos mais usuais, destacamos a matriz de transferência e o grupo de renormalização [68, 69], onde estes métodos podem ser usados para quaisquer dimensões e permite o estudo de sistemas grandes ($N \gg 10^5$).

Vamos mostrar o método de matriz transferência, considerando o modelo *tight-binding* unidimensional dado pelo hamiltoniano de Anderson:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n [J_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1| + J_{n-1,n} |n\rangle \langle n-1| + c.c], \quad (2.49)$$

onde $|n\rangle$ é orbital atômico no sítio n e ϵ_n é o potencial aleatório. Utilizando a expansão $|\psi\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$ na equação (2.49), obtemos

$$J_{n,n+1} f_{n+1} + J_{n-1,n} f_{n-1} = (E - \epsilon_n) f_n. \quad (2.50)$$

Podemos reescrever esta última equação na forma matricial, portanto,

$$\begin{pmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E - \epsilon_n)}{J_{n,n+1}} & -\frac{J_{n-1,n}}{J_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_n \\ f_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

onde esta matriz 2×2 é conhecida como *matriz de transferência*. Uma forma mais compacta da equação (2.51) é dada por

$$F_{n+1} = T_n F_n, \quad (2.52)$$

onde

$$F_{n+1} = \begin{pmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

e T_n é a matriz de transferência, ou seja,

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{(E - \epsilon_n)}{J_{n,n+1}} & -\frac{J_{n-1,n}}{J_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Dado uma condição inicial $F_0 = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix}$, podemos encontrar as amplitudes da função de onda nos sítios $N - 1$ e N a partir do produto de todas as matrizes de transferência, ou seja,

$$F_N = \left[\prod_{n=1}^N T_n \right] \times F_0. \quad (2.55)$$

Portanto, o expoente de Lyapunov γ é dado por

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|F_N|}{|F_0|}. \quad (2.56)$$

Quando o expoente de Lyapunov é finito no limite termodinâmico, a função de onda também é finita e o estado é localizado. Mas quando o expoente vai a zero no limite termodinâmico a função de onda é estendida [69].

Do ponto de vista numérico, o cálculo de γ apresenta instabilidade, pois a matriz resultante do produtório ($\prod_n T_n$) termina possuindo elementos grandes ou pequenos demais [68]. Para contornar isso, no caso unidimensional, multiplicamos o produtório por constantes para controlar a instabilidade. Esse procedimento é feito da seguinte maneira, ao longo da execução do produtório quando os termos da matriz resultante são menores que 10^{-10} multiplicamos a matriz toda por $A = 10^{10}$; para o caso em que os termos sejam maiores que

10^{10} , multiplicamos pela constante $B = 10^{-10}$. Portanto, ao final do cálculo do produtório teremos $A^{n_a} B^{n_b} \prod_n T_n$, onde n_a e n_b são os números de vezes que multiplicamos a matriz por A e B , respectivamente. Com isso, podemos obter

$$\begin{aligned}\gamma^* &= \frac{1}{N} \log \frac{|A^{n_a} B^{n_b} \prod_n T_n F_0|}{|F_0|} \\ \gamma^* &= \frac{1}{N} [n_a \log A + n_b \log B] + \frac{1}{N} \log \frac{|\prod_n T_n F_0|}{|F_0|},\end{aligned}\quad (2.57)$$

que é diferente do expoente de Lyapunov γ . A partir desta relação (2.57) entre γ^* e γ , podemos encontrar

$$\gamma = \frac{1}{N} \log \frac{|\prod_n T_n F_0|}{|F_0|} = \gamma^* - \frac{1}{N} [n_a \log A + n_b \log B], \quad (2.58)$$

para N grande sem problemas de instabilidade numérica.

2.5.2 Evolução Temporal e Quantidades Dependentes do Tempo

Considerando o modelo de Anderson 1D com N sítios, no qual o elétron em $t = 0$ está no sítio m , de maneira que $|c_m(t = 0)|^2 = 1$ e $c_n(t = 0) = 0$ para $n \neq m$. Logo, a evolução temporal para o estado inicialmente localizado é dada pela solução de Schrödinger dependente do tempo, ou seja,

$$i\hbar \frac{df_n(t)}{dt} = \epsilon_n f_n(t) + J_{n-1,n} f_{n-1}(t) + J_{n,n+1} f_{n+1}(t), \quad \text{onde } n = 1, 2, \dots, N. \quad (2.59)$$

Vamos assumir que o conjunto de equações (2.59) tenha solução. A partir disso, examinaremos os seguintes casos, quando a probabilidade de encontrar o elétron no sítio m , depois de um longo período de tempo, for zero ($f_m(t \rightarrow \infty) = 0$). Este resultado mostra um forte

indicativo que no limite termodinâmico, o elétron é itinerante ao longo da cadeia (estado estendido). Outro caso, é quando $f_m(t \rightarrow \infty) \neq 0$, ou seja, o elétron não está sendo difundido ao longo da cadeia e pode ser localizado apenas nas vizinhanças de m (estado localizado). A quantidade física $|f_m(t)|^2$ é conhecida como *probabilidade de retorno* ao ponto de partida. Existem vários métodos numéricos para resolver o conjunto de equações (2.59), onde destacamos o método de Euler, Runge-Kutta de 4^a ordem, Taylor e diagonalização direta.

O cálculo do operador de evolução temporal é um dos métodos mais precisos para obter a dinâmica de um estado quântico [68, 76], pois o procedimento é formalmente exato, por outro lado, existe uma limitação computacional em razão do cálculo exigir a diagonalização total do hamiltoniano do sistema. Para um problema geral da Mecânica Quântica com hamiltoniano H , a dinâmica do sistema é obtido por [68]

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle, \quad (2.60)$$

onde $|\Psi(t=0)\rangle$ é o estado inicial e $e^{-iH\frac{t}{\hbar}}$ é o operador de evolução temporal. Expandindo os estados $|\Psi(t)\rangle$ e $|\Psi(t=0)\rangle$ na base de orbitais $|n\rangle$ do espaço de Hilbert, obtemos

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle \quad (2.61)$$

e

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle. \quad (2.62)$$

Substituindo as equações (2.112) e (2.62) na equação (2.110), obtemos uma relação entre $f_n(t)$ e $f_n(0)$:

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} \sum_n f_n(0) |n\rangle. \quad (2.63)$$

Lembrando que o conjunto $\{|n\rangle\}$ é uma base do espaço de Hilbert. Logo, podemos utilizar este conjunto para escrever uma representação matricial do hamiltoniano H e/ou expandir os seus autovetores. Seja $|E\rangle$ um autovetor do hamiltoniano H , ou seja, $H|E\rangle = E|E\rangle$, onde E é o autovalor. Logo, o autovetor pode ser escrito como

$$|E\rangle = \sum_n z_n^E |n\rangle. \quad (2.64)$$

Utilizando a equação (2.64) para expandir o estado inicial, ou seja,

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= \sum_E [\langle E|\psi_0\rangle] |E\rangle \\ |\Psi(0)\rangle &= \sum_{\substack{n,m \\ E}} [z_m^{E*} f_n(0)] (\langle m|n\rangle) |E\rangle. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Vamos assumir que o hamiltoniano H é real e hermitiano, onde $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$, daí teremos

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= \sum_{n,E} z_n^E f_n(0) |E\rangle \\ |\Psi(0)\rangle &= \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Substituindo a equação (2.66) na equação (2.110) para realizar a evolução temporal, obtemos

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle, \quad (2.67)$$

ou ainda,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle. \quad (2.68)$$

Em seguida, usando as equações (2.112) e (2.64), teremos

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sum_m z_m^E |m\rangle. \quad (2.69)$$

Fazendo $Z(E) = \sum_n z_n^E f_n(0)$, temos

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_{E,m} Z(E) z_m^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |m\rangle \quad (2.70)$$

e para eliminar um somatório realizamos uma mudança de variáveis $m \rightarrow n$, ou seja,

$$f_n(t) = \sum_E Z(E) z_n^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (2.71)$$

Para o modelo de Anderson 1D, este método é interessante para cadeias pequenas com $N < 10000$, devido ao custo computacional ser bem caro. Já para sistemas grandes as técnicas tradicionais como método de Runge-Kutta e Taylor são mais recomendáveis [68].

A seguir apresentamos o método de Taylor que é obtido a partir da expansão de Taylor do operador de evolução temporal. Considerando a equação de Schrödinger unidimensional com o termo de hopping $J = 1$:

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n + f_{n+1} + f_{n-1}, \quad \text{onde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.72)$$

A expansão de Taylor para o operador de evolução temporal é dada por

$$U(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \approx 1 + \sum_{k=1}^{n_0} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!}, \quad (2.73)$$

onde H representa o hamiltoniano do modelo e n_0 é a ordem do truncamento da soma. Vamos considerar agora, que o estado inicial é dado por $|\psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle$. Logo, podemos encontrar o estado $|\psi(t)\rangle$ a partir de

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = \left[1 + \sum_{k=1}^{n_0} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \right] |\psi(0)\rangle \\ &= |\psi(0)\rangle + \sum_{k=1}^{n_0} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} |\psi(0)\rangle. \end{aligned} \quad (2.74)$$

onde $|\psi(t)\rangle$ é o estado quântico no tempo t . Para $t = \Delta t < 1$, o estado $|\psi(\Delta t)\rangle$ é dado

por uma soma de potências do hamiltoniano aplicados ao estado inicial $|\psi(0)\rangle$. O termo do somatório pode ser expandido da seguinte maneira

$$\sum_k \left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} |\psi(0)\rangle = -\frac{iH\Delta t}{\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (2.75)$$

$$+ \left[\left(\frac{-i\Delta t}{\hbar}\right)^2 \frac{H^2}{2!} + \left(\frac{-i\Delta t}{\hbar}\right)^3 \frac{H^3}{3!} + \left(\frac{-i\Delta t}{\hbar}\right)^4 \frac{H^4}{4!} + \dots \right] |\psi(0)\rangle, \quad (2.76)$$

onde cada termo tem uma constante de valor $\left(\frac{-i\Delta t}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!}$ multiplicada por H^k . Portanto, para calcular o estado $|\psi(\Delta t)\rangle$ devemos encontrar $H^k |\psi(0)\rangle$, mas o cálculo de H^k não é simples, sobretudo para uma cadeia muito grande. Vamos adotar um procedimento recursivo para calcular $H^k |\psi(0)\rangle$. Obtendo inicialmente $H^1 |\psi(0)\rangle$, usando a forma da equação de Schrödinger inicial do sistema, ou seja,

$$H^1 |\psi(0)\rangle = H^1 \sum_n f_n(0) |n\rangle = \sum_n [\epsilon_n f_n(0) + f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)] |n\rangle. \quad (2.77)$$

Fazendo $C_n^1 = \epsilon_n f_n(0) + f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)$, obtemos $H^1 |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^1 |n\rangle$. Para encontrar o próximo, $H^2 |\psi(0)\rangle$ o procedimento é semelhante, ou seja, $H^2 |\psi(0)\rangle = H(H |\psi(0)\rangle)$, onde $H |\psi(0)\rangle$ já é conhecido. Dessa forma, temos $H^2 |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^2 |n\rangle$, tal que $C_n^2 = \epsilon_n C_n^1 + C_{n+1}^1 + C_{n-1}^1$. Generalizando para $H^k |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^k |n\rangle$, temos que

$$C_n^k = \epsilon_n C_n^{k-1} + C_{n+1}^{k-1} + C_{n-1}^{k-1}. \quad (2.78)$$

Dessa maneira, podemos encontrar todos os produtos $H^k |\psi(0)\rangle$ e conseqüentemente obter o estado quântico do sistema no tempo $t = \Delta t$. Para obter a solução numérica para um tempo t_m , devemos aplicar essa técnica de maneira sucessiva.

Depois de implementar um dos métodos citados anteriormente, para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, as medidas do grau de localização dependente do tempo podem ser realizadas de maneira análoga ao caso independente do tempo.

Dessa forma, a participação dependente do tempo é dada por

$$\xi(t) = \left(\sum_n |f_n(t)|^4 \right)^{-1}. \quad (2.79)$$

Vamos considerar para um tempo longo que todas as amplitudes da função de onda são iguais, ou seja, $f_n(t \rightarrow \infty) = f$. De maneira análoga, ao caso da participação independente do tempo, obtemos

$$\xi(t \rightarrow \infty) = N. \quad (2.80)$$

O comportamento temporal típico da participação é dado por

$$\xi(t) = t^a. \quad (2.81)$$

Para $a = 0$, indica estados localizados, pois a participação é constante ao longo do tempo; quando $0 < a < 1$, indica a existência de regimes de difusão; e quando $a = 1$, indica estados estendidos (regime metálico).

O desvio médio quadrático dependente do tempo é

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n - \langle n(t) \rangle)^2 |f_n(t)|^2}, \quad (2.82)$$

onde $\langle n(t) \rangle$ é a posição média do pacote de onda. Considerando um estado uniforme, ou seja, $|f_n(t \rightarrow \infty)|^2 = |f|^2 = 1/N$, podemos calcular o desvio médio quadrático para um tempo longo $\sigma(t \rightarrow \infty)$:

$$\sigma(t \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_n (n - \langle n(t) \rangle)^2}. \quad (2.83)$$

No limite de N grande, fazendo a variável $n^* = n - \langle n(t) \rangle$ e transformando o somatório em uma integral, obtemos

$$\sigma(t \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{1}{N} \int_0^N (n^*)^2 dn^*} \sim N. \quad (2.84)$$

Está equação (2.84) mostra que para tempo longo, o σ é da ordem de N . De maneira semelhante a função de participação $\xi(t)$, o desvio médio quadrático exibe comportamento típico dado por

$$\sigma(t) \propto t^b. \quad (2.85)$$

Quando $b = 0$, indica uma localização da função de onda; para valor de $0 < b < 0.5$, aponta uma dinâmica subdifusiva; para valor de $0.5 < b < 1$, indica uma dinâmica superdifusiva; já quando $b = 1$, indica uma dinâmica balística (estados metálicos).

A entropia de Shannon dependente do tempo é definida por

$$S(t) = - \sum_n |f_n(t)|^2 \log(|f_n(t)|^2). \quad (2.86)$$

2.6 Efeito do Campo Elétrico

Considerando uma rede unidimensional com N sítios igualmente espaçados sob o efeito de um campo elétrico estático \mathbf{E} paralelo a rede, ou seja, $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_x$, onde $\mathbf{e}_x = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$ e a é o espaçamento da rede, como mostra a Figura 2.6. Portanto, a energia potencial da interação do elétron com o campo elétrico é dada por

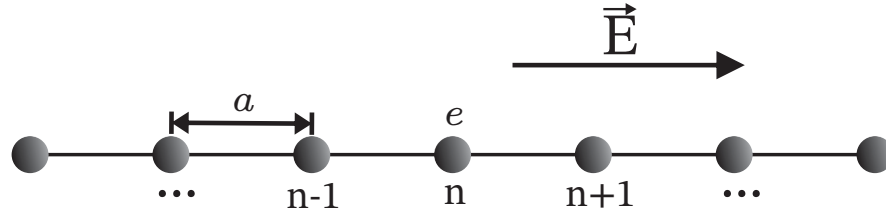
$$P_n^E = \int_0^r eE d\mathbf{x} = eEna, \quad (2.87)$$

onde e é a carga da partícula. Escolhendo $e = a = \hbar = 1$, o termo diagonal do modelo de Anderson unidimensional sob ação de um campo elétrico estático é dado por

$$\epsilon_n = P_n^E + \epsilon_n^* = En + \epsilon_n^*, \quad (2.88)$$

onde ϵ_n^* é a desordem diagonal do modelo de Anderson 1D distribuído uniformemente no intervalo de $[-W/2, W/2]$ e E é o valor do campo elétrico. Dessa forma, a equação de

Figura 2.6: Esquema da rede unidimensional sob ação de um campo elétrico estático paralelo ao sistema.



Fonte: Autor.

Schrödinger unidimensional é escrita da seguinte forma

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = (En + \epsilon_n^*)f_n + (f_{n+1} + f_{n-1})J, \quad (2.89)$$

onde f_n é amplitude da função de onda no sítio n . Para o caso em que a largura de desordem $W = 0$, o problema retorna para o caso de um elétron se movendo em um cristal unidimensional sob ação de um campo elétrico estático paralelo à rede.

Utilizando a abordagem semiclássica em que o hamiltoniano geral para o problema cristalino 1D com o campo elétrico estático é dado por

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) - nE, \quad (2.90)$$

onde $V(x)$ é constante para cada posição $x = an$ da rede. Em seguida, pela equação de Hamilton calculamos

$$\dot{p} = -\frac{dH}{dx} = E. \quad (2.91)$$

Integrando a equação (2.91) em relação ao tempo, obtemos

$$p = Et + p_0. \quad (2.92)$$

Temos que $p = \hbar k$, $\hbar = 1$ e que o número de onda k pode ser escrito como

$$k = Et + k_0. \quad (2.93)$$

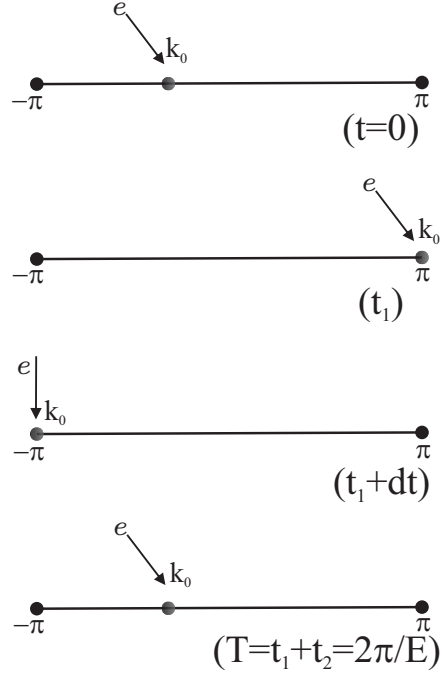
Observa-se que no tempo $t = 0$, o elétron possui o número de onda k_0 ; para um tempo $T = 2\pi/E$ o número de onda percorre toda a primeira zona de Brillouin [68]. Por causa da periodicidade da rede o valor de k varia entre $-\pi/a$ e π/a , onde a ($a = 1$) é o período do potencial da rede. Para analisar de forma simples a dinâmica eletrônica na zona de Brillouin, consideramos que o número de onda inicial em $t = 0$ é dado por $k(t = 0) = k_0$, depois de um dado tempo t_1 , o k cresce linearmente até o valor máximo π que corresponde o limite superior da zona de Brillouin. No instante t_1 , o k atinge o valor máximo permitido, então, em um instante $t_1 + dt$, o elétron é “rejeitado” e k passa para um valor de $-\pi$, que corresponde o limite esquerdo da zona de Brillouin. No instante t_2 , o elétron retorna ao valor inicial de $k = k_0$ e o tempo total é igual a $2\pi/E$ (período de oscilação). Dessa forma, o elétron em um sistema periódico da presença de campo elétrico exibe um comportamento oscilatório dentro da zona de Brillouin, como mostra a Figura 2.7. Logo, a frequência de oscilação é dada por

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = E. \quad (2.94)$$

Na literatura este tipo de fenomenologia oscilatória com uma única frequência ($\omega = E$) é conhecido como *Oscilações de Bloch*. Salientamos, que no espaço real o elétron também fica oscilando, uma vez que a troca no sinal de k ($-\pi$ ou π) representa uma mudança de sentido do movimento dentro do espaço real, portanto, um elétron com valor inicial de k_0 em uma dada posição x_0 da cadeia vai exibir um movimento oscilatório em torno da posição inicial x_0 .

Com o objetivo de comparar com a formulação semiclássica, consideramos primeiramente o caso sem desordem, ou seja, $W = 0$. Portanto, a equação

Figura 2.7: Representação da dinâmica eletrônica sob ação de um campo elétrico dentro da zona de Brillouin. O elétron inicia seu movimento com k_0 , em seguida no instante t_1 , o k cresce linearmente até chegar no valor de π e depois rejeitado até o outro extremo com valor $-\pi$. O valor continua crescendo linearmente até retornar ao valor inicial k_0 .



Fonte: Retirado de [68].

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = nE f_n + (f_{n+1} + f_{n-1})J. \quad (2.95)$$

Na literatura é usual escolher o campo elétrico como sendo $(n - \frac{N}{2}) E$, pois somar ou subtrair uma constante no termo potencial não altera qualitativamente os resultados. Considerando a condição inicial do tipo Gaussiana:

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle \quad (2.96)$$

e

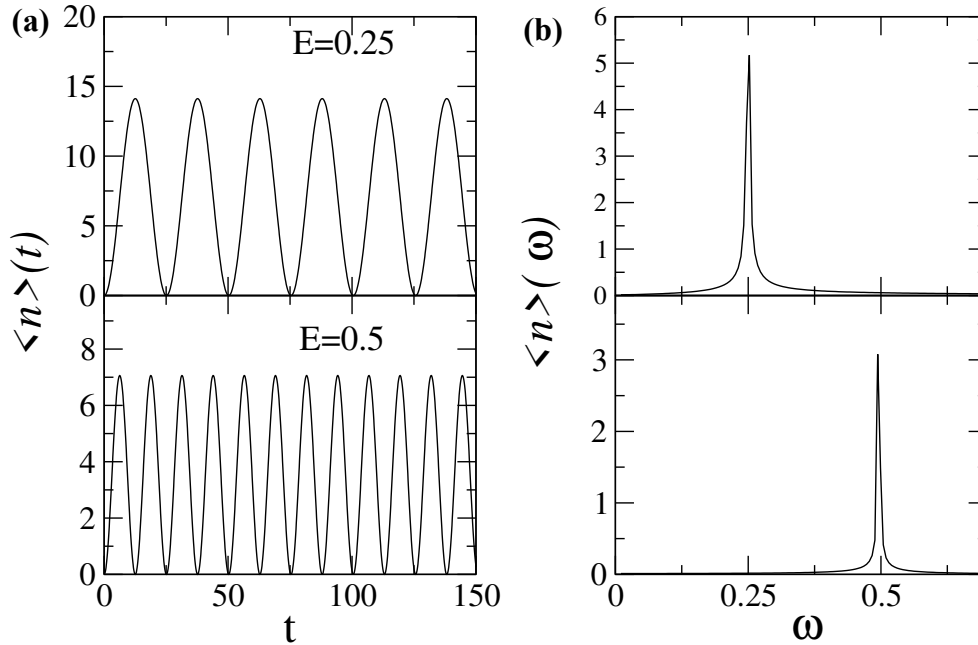
$$f_n(0) = \frac{1}{A} e^{-\frac{(n - \frac{N}{2})^2}{4\Sigma^2}}, \quad (2.97)$$

onde Σ é a largura inicial do pacote e A é uma constante de normalização definida como

$$A = \sum_n e^{-\frac{(n - \frac{N}{2})^2}{2\Sigma^2}}. \quad (2.98)$$

A Figura 2.8(a) mostra a posição média $\langle n \rangle$ do elétron *versus* o tempo t para $\Sigma = 1$, $E = 0.25$ e 0.5 . Usamos o método de Runge-Kutta de 4^a ordem para resolver a equação de Schrödinger com $dt = 0.002$. Podemos observar o padrão oscilatório do elétron, onde a frequência foi obtida por meio da transformada de Fourier, como sendo $\omega \approx E$, ou seja, o resultado está de acordo com previsto na abordagem semiclássica, como mostra a Figura 2.8(b) da posição média $\langle n \rangle$ em função da frequência ω .

Figura 2.8: (a) Posição média eletrônica em função do tempo em um sistema unidimensional sem desordem ($W = 0$) sob ação de um campo elétrico ($E = 0.25$ e 0.5), observa-se claramente o movimento oscilatório. (b) Posição média $\langle n \rangle$ em função da frequência ω , o movimento oscilatório com frequência $\omega \approx E$ está de acordo com a abordagem semiclássica.

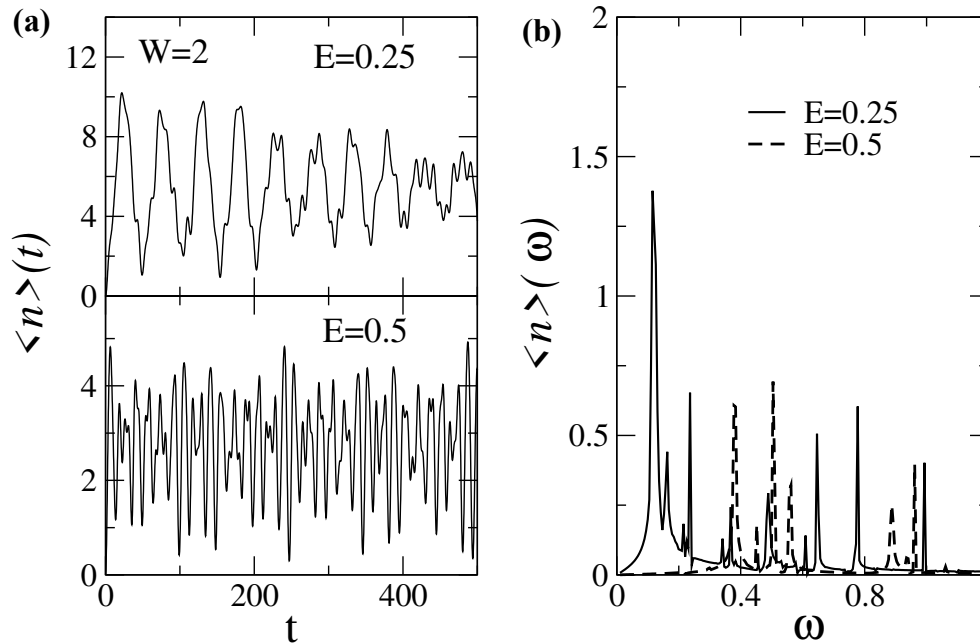


Fonte: Retirado de [68].

Para o caso em que existe desordem $W \neq 0$, o comportamento oscilatório não é observado, devido ao espalhamento da função de onda que causam interferências destrutivas, ou seja, a função de onda é localizada. A Figura 2.9 mostra a posição média eletrônica em

uma cadeia com desordem $W = 2$ sob ação de um campo elétrico para dois valores $E = 0.25$ e 0.5 . Observou-se a ausência do comportamento oscilatório típico de *Oscilações de Bloch*, como mostra a Figura 2.9(a). Na Figura 2.9(b) mostra a existência de várias frequências no movimento eletrônico, obtidas por meio da transformada de Fourier da posição média. A localização do pacote de onda sob os efeitos de desordem e campo elétrico é chamada de *localização dinâmica*.

Figura 2.9: (a) Posição média eletrônica em função do tempo em um sistema unidimensional com desordem ($W \neq 0$) sob ação de um campo elétrico ($E = 0.25$ e 0.5), observa-se a ausência do comportamento oscilatório, ou seja, a inexistência de uma oscilação coerente. (b) A existência de várias frequências no movimento eletrônico.



Fonte: Retirado de [68].

2.7 Introdução a computação quântica: Alguns conceitos fundamentais

Computação é uma área da matemática pura, no entanto, os computadores estão

sujeitos às leis da Física, pois fazem parte do mundo físico [64]. Consequentemente, a informação é física e o processamento só pode ser realizado por meios físicos [77]. O funcionamento de periférico, as conexões em sistema de redes (exemplo *Internet*), a capacidade de memória, a velocidade de processamento, obedecem às leis da Física: do eletromagnético, da termodinâmica e da mecânica [64]. A *computação quântica* é uma forma nova de processamento de informação, diferentemente dos métodos tradicionais de computação, nos quais são denominados de *computação clássica* e *informação clássica* em que o *bit* é o conceito fundamental [78, 79].

2.7.1 Bits e Qubits (Q-bits)

A unidade de informação clássica operada por computadores é o *bit*. O *bit* é um objeto matemático que possui dois valores lógicos possíveis 0 ou 1. O *bit* também pode ser pensado, como por exemplo, um interruptor mecânico (ligado ou desligado), moeda (cara ou coroa), é um sistema projetado para ter dois estados distinguíveis [78, 80]. Podemos representar informações (imagens, sons, números, etc) ao agrupar os *bits* e, ao manipular os *bits* conseguimos realizar cálculos arbitrários [81]. Nos computadores, os *bits* são representados por transistores, onde os estados 0 e 1 representam a passagem ou não de corrente elétrica pelo transistor, respectivamente. Um aspecto clássico do estado lógico é de que são mutuamente exclusivos, isto é, os bits não podem ser 0 e 1 simultaneamente [64].

De maneira semelhante, a unidade de informação quântica é o *bit quântico* ou *qubit*. A diferença entre um *bit* e um *qubit* é o fato que o *qubit* pode estar em um estado de superposição, ou seja, pode existir simultaneamente nos estados 0 e 1 [78, 82]. Em geral, qualquer sistema quântico que tenha pelo menos dois estados bem distinguíveis pode representar um *qubit*. Os exemplos mais comuns são o spin-1/2 de algumas partículas, como o elétron (pode ser *spin-down* ou *spin-up*), os estados de polarização de um fóton (pode ser horizontal ou vertical) e etc [80]. Os autoestados de um *qubit* são dados por

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \quad (2.99)$$

onde $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ forma uma base no espaço de Hilbert de duas dimensões, denominadas de base computacional. Logo, o estado de um *qubit* é

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle , \quad (2.100)$$

onde α e β são números complexos que satisfazem $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Estas amplitudes de probabilidade α e β podem ser mapeadas em ângulos θ e ϕ , fazendo-se $\alpha \equiv \cos \theta/2$ e $\beta \equiv e^{i\phi} \sin \theta/2$ [64]. Portanto,

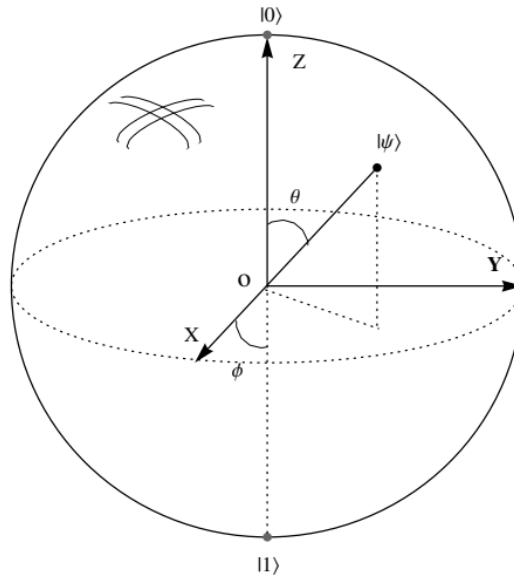
$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle , \quad (2.101)$$

Esta representação é útil pois permite que o estado de um *qubit* seja observado geometricamente como um ponto sobre a superfície de uma esfera, conhecida como a *esfera de Bloch*, como mostra a Figura 2.10. Como θ e ϕ variam continuamente ($0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$), qualquer número real pode ser armazenado em um estado quântico de um *qubit* [64, 81]. O raio da esfera é 1 e os pólos são os autoestados computacionais, $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

2.7.2 Emaranhamento

Na mecânica quântica um dos aspectos mais fascinantes é o fato de que partículas ou sistemas podem se emaranhar [79]. *Emaranhamento* é um tipo único de *correlação* compartilhada entre os componentes de um sistema quântico [83]. Se considerarmos dois sistemas, A e B , que sejam emaranhados, ou seja, os valores de certas propriedades do sistema A estão correlacionados com os valores que essas propriedades assumirão para o sistema B [79]. Essas propriedades podem se tornar correlacionadas mesmo quando os sistemas são separados espacialmente. Devido às correlações não locais, os sistemas (ou partículas) não podem ser mais

Figura 2.10: A esfera de Bloch é uma representação geométrica dos estado de um *qubit*, onde os pólos são os autoestados computacionais, $|0\rangle$ e $|1\rangle$.



Fonte: Retirado de [82].

descritos independentemente um dos outros [77]. Além disso, as medições que são realizadas no sistema (ou partícula) não nos fornece uma informação global, e altera instantaneamente os estados do outro sistema (ou partícula), mesmo que não exista nenhuma interação [77].

Um exemplo de estado *emaranhado* de dois *qubits* é

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle + |11\rangle \quad . \quad (2.102)$$

A mecânica quântica nos diz que antes de realizar qualquer medida, ambos os *qubits* podem ser encontrados em 0 ou 1, com igual probabilidade [64]. Por outro lado, quando efetuamos uma medida sobre o primeiro *qubit* e o resultado for 0, imediatamente o estado do segundo *qubit* será 1, ou vice-versa. Os *qubits* de um estado emaranhado agem como um único objeto, mesmo sem existir nenhuma interação entre eles [64]. Os estados quânticos emaranhados não podem ser fatorados em um estado-produto [84], ou seja, não pode ser escrito como $|\psi_1\rangle |\psi_0\rangle$. Como prova, vamos tentar reescrever a equação (2.102) como um estado-produto da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle |\psi_0\rangle &= (\alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle)(\alpha_0 |0\rangle + \beta_0 |1\rangle) \\
&= \alpha_1\alpha_0 |00\rangle + \alpha_1\beta_0 |01\rangle + \beta_1\alpha_0 |10\rangle + \beta_1\beta_0 |11\rangle \quad . \quad (2.103)
\end{aligned}$$

Igualando os coeficientes, obtemos

$$\alpha_1\alpha_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad \alpha_1\beta_0 = 0 \quad , \quad \beta_1\alpha_0 = 0 \quad , \quad \beta_1\beta_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad . \quad (2.104)$$

A segunda expressão nos diz que $\alpha_1 = 0$ ou $\beta_0 = 0$. Isso implica que a primeira e quarta expressão seja $0 = 1/\sqrt{2}$, o que é falso. Portanto, $|\Phi^+\rangle$ não pode ser escrito como um estado-produto. Logo, é um estado emaranhado [84]. Os estados emaranhados possibilitam, dentro da computação quântica e informação quântica, realizar de forma eficiente tarefas como protocolos de comunicação invioláveis [77]. Outras duas aplicações diretas são a *codificação superdensa* e o *teletransporte quântico* [78, 77].

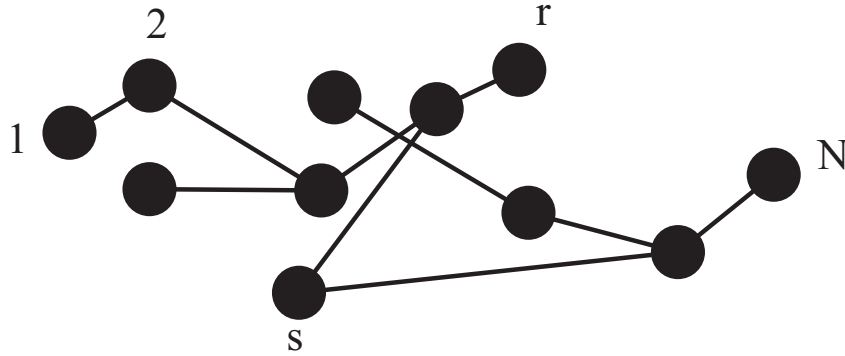
2.8 Protocolo de transferência de estado quântico em cadeias de spins

Um dos grandes desafios para desenvolvimento do computador quântico é encontrar métodos e canais apropriados para transmissão de informação quântica em longas distâncias [1]. Um dos melhores candidatos estudados para desempenhar esse papel são os fótons [85]. Já para comunicação de informação quântica em curtas distância, que são importantes para criação dos componentes para o computador quântico (como por exemplo os processadores quânticos, memórias e etc.), as cadeias de spins são fortes promissores para operar como canais ou fios para transmissão de estados quânticos [1, 2].

O primeiro a propor uma cadeia de spins para realizar um protocolo de transferência

de estados quânticos (QST) foi S. Bose em seu trabalho em 2003 [1]. A seguir, vamos detalhar de maneira sucinta o protocolo de comunicação quântico definido por S. Bose nas referências [1, 2]. Considerando um grafo arbitrário \mathbf{G} , onde os vértices representam os spins e as arestas suas interações, como mostra a Figura 2.11.

Figura 2.11: Representação de um grafo arbitrário de spins, no qual a comunicação ocorre do spin s (emissor) para o spin r (receptor). Os vértices representam os spins e as arestas as conexões entre os spins.



Fonte: Retirado de [1].

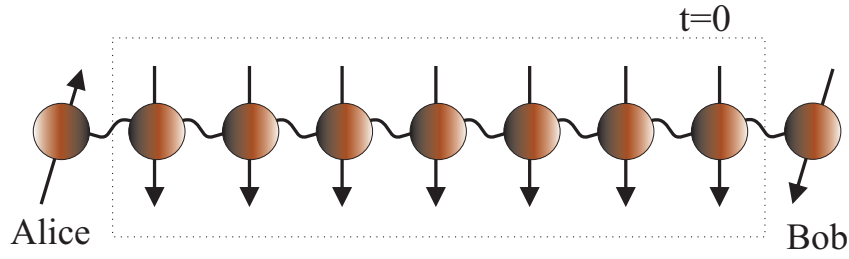
O grafo tem N spins que estão enumerados de $1, \dots, N$ e possuem interações do tipo ferromagnética de Heisenberg. Logo, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H_G = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \boldsymbol{\sigma}^i \boldsymbol{\sigma}^j - \sum_{i=1}^N B_i \sigma_z^i \quad , \quad (2.105)$$

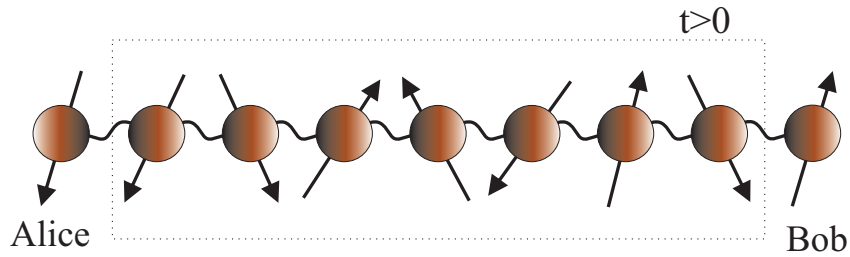
onde $J_{ij} > 0$ são as forças de acoplamento, $\langle i, j \rangle$ representam os pares de spins, $\boldsymbol{\sigma}^i = (\sigma_x^i, \sigma_y^i, \sigma_z^i)$ são as matrizes de Pauli e $B_i > 0$ é campo magnético estático.

Antes de iniciar o protocolo de comunicação quântica (Alice e Bob) devemos preparar a cadeia no estado fundamental, onde todos os spins estão alinhados ao longo do eixo $-z$, como observar na Figura 2.12(a). Logo, o estado fundamental é representado por $|\mathbf{0}\rangle = |0_1 0_2 \dots 0_N\rangle$, onde $|0\rangle$ representa o estado de *spin down*. Definindo a energia fundamental como $E_0 = 0$ e reescrevendo o Hamiltoniano do sistema levando em conta E_0 , isto é, $H = E_0 + H_G$. Também consideramos uma classe de estados dado por $|\mathbf{j}\rangle = |0_1 0_2 \dots 1_j \dots 0_N\rangle$, onde $j = 1, 2, \dots, s, \dots, r, \dots, N$, em que o spin no sítio j -ésimo é excitado para o estado $|1\rangle$.

Figura 2.12: Representação do protocolo de comunicação quântica entre Alice e Bob, que se encontram nos extremos opostos da cadeia.



(a) Em $t = 0$, a cadeia de spin se encontra em seu estado fundamental em um campo magnético externo. Alice prepara o estado quântico que deseja transmitir no spin mais próximo a ela.



(b) Para um tempo $t > 0$, Bob recebe o estado transmitido por Alice com certa fidelidade no spin mais próximo a ele.

Fonte: Adaptado de [1, 77].

Para iniciar o protocolo de comunicação quântica, Alice prepara um spin no estado desconhecido $|\Psi_{\text{in}}\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\text{sen}(\theta/2)|1\rangle$ no s -ésimo sítio da cadeia (ver Figura 2.12(a)). Dessa forma, podemos descrever o estado inicial ($t = 0$) de toda cadeia como

$$|\Psi_{\text{in}}(t = 0)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi}\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)|\mathbf{s}\rangle \quad . \quad (2.106)$$

Para Bob obter o estado transmitido por Alice, ele espera um determinado tempo t até que o estado inicial evolua sob seu Hamiltoniano (2.105) para um estado final que será igual ou o mais próximo possível do estado inicial, $|\Psi(t)\rangle = \cos(\theta/2)|\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi}\text{sen}(\theta/2)|\mathbf{r}\rangle$ (ver Figura 2.12(b)). Para encontrar $|\Psi\rangle$ em um instante t , usamos operador de evolução temporal $U(t) = e^{-iHt}$ aplicado ao estado inicial (2.106), onde fizemos $\hbar = 1$, ou seja, $|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle$. Como $|\mathbf{0}\rangle$ não evolui com o tempo, pois é um autoestado com autoenergia

$E_0 = 0$, então, $e^{-iHt} |\Psi(\mathbf{0})\rangle = |\Psi(\mathbf{0})\rangle$ [1, 86].

O segundo termo do Hamiltoniano (2.105) descreve uma interação de troca entre spins, ou seja, $|0\rangle_1 |0\rangle_2 \dots |1\rangle_i |0\rangle_{i+1} |0\rangle_N$ vai para $|0\rangle_1 |0\rangle_2 \dots |0\rangle_i |1\rangle_{i+1} |0\rangle_N$, portanto o número total de excitações é conservada [1, 2, 87, 77]. Dessa maneira, o Hamiltoniano H comuta com magnetização de spin total $\sum_{i=1}^N \sigma_z^i$ ao longo do eixo z , isto é, $[H, \sum_{i=1}^N \sigma_z^i] = 0$. Portanto, o estado $|\mathbf{s}\rangle$ evolui como superposição de estado $|\mathbf{j}\rangle$ e a dinâmica é dada por

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sum_{\mathbf{j}=1}^N \langle \mathbf{j} | e^{-iHt} | \mathbf{s} \rangle |\mathbf{j}\rangle \quad , \quad (2.107)$$

ou

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sum_{\mathbf{j}=1}^N f_{r,s}(t) |\mathbf{j}\rangle \quad , \quad (2.108)$$

onde $f_{r,s}(t) = \langle \mathbf{j} | e^{-iHt} | \mathbf{s} \rangle$ é a amplitude de transição de uma excitação do s -ésimo para o r -ésimo sítio de um grafo com N spins [1, 2].

Nosso objetivo é observar o estado de saída $|\psi_{\text{out}}\rangle$, para isso devemos encontrar a matriz densidade $\rho_{\text{out}}(t)$ do estado de saída através do *traço parcial* (ver Apêndice A.1). Portanto, o operador densidade $\rho_{\text{out}}(t)$ é dado por $\text{tr}_{1,2,\dots,N-1}(|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|)$. E $\rho_{\text{out}}(t)$ evolui no tempo da seguinte maneira

$$\rho_{\text{out}}(t) = P(t) |\psi_{\text{out}}(t)\rangle\langle\psi_{\text{out}}(t)| + (1 - P(t)) |0\rangle\langle 0| \quad (2.109)$$

com

$$|\psi_{\text{out}}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{s,r}^N(t) |1\rangle \right) \quad , \quad (2.110)$$

onde

$$f_{s,r}^N(t) = \langle \mathbf{r} | e^{-iHt} | \mathbf{s} \rangle \quad (2.111)$$

e

$$P(t) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{s,r}^N(t)|^2 \quad . \quad (2.112)$$

Para completar o protocolo de comunicação quântico, Bob precisa pegar o r -ésimo spin em um determinado tempo $t = t_0$. A eficiência da transferência de estado quântico entre os sítio 1 e N , pode ser determinada pelo cálculo da *fidelidade*. A *fidelidade* média de comunicação quântica através do canal sobre todos os estados puros de entrada $|\psi_{\text{in}}\rangle$ na esfera de Bloch é dada por [1, 2]

$$F(t_0) = \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{\text{in}} | \rho_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle d\Omega \quad . \quad (2.113)$$

Fazendo a integração (ver Apêndice em A.2), obtemos

$$F(t_0) = \frac{1}{3} |f_{r,s}^N(t_0)| \cos \gamma + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \frac{1}{2} \quad , \quad (2.114)$$

onde fizemos $\gamma = \arg(f_{r,s}^N(t_0))$. Com objetivo de maximizar a média da fidelidade escolhemos o campo magnético externo B_i de tal modo que γ seja múltiplo de 2π , ou seja, $\cos \gamma = 1$. Em consequência da escolha de B_i , que pode ser feita para qualquer t_0 , podemos substituir $f_{r,s}^N(t_0)$ por $|f_{N,1}^N(t_0)| = |f_N(t)|$ na equação (2.110) [1, 2]. Dessa forma, obtemos

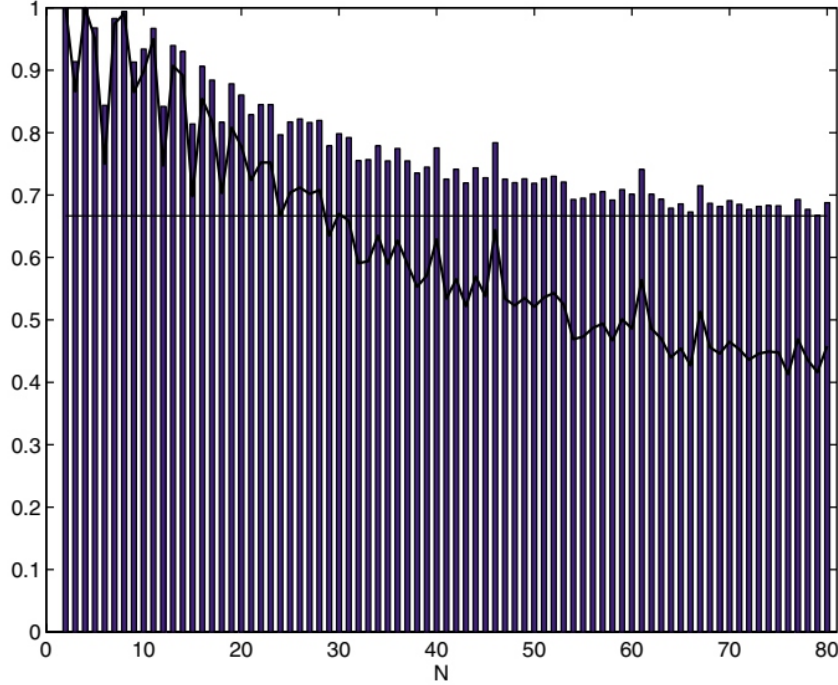
$$F(t) = \frac{1}{3} |f_N(t)| + \frac{1}{6} |f_N(t)|^2 + \frac{1}{2} \quad . \quad (2.115)$$

Quando a *fidelidade* $F = 1$, a transmissão de estado quântico é perfeita, mas quando $F = 1/2$ nada é transferido, ou seja, $f_N(t) = 0$.

Nos resultados, S. Bose [1] mostrou em suas simulações numéricas que para cadeias com $N = 2$ e $N = 4$, a transferência de estados quânticos é perfeita, isto é, $F = 1$, como mostra a Figura 2.13. Quando o tamanho da cadeia N aumenta, a fidelidade de transmissão de estado diminui gradativamente, como também podemos visualizar na Figura 2.13. A fidelidade ultrapassa 0.9 apenas para alguns valores de N menores que 17. Também foi possível observar que para transmissão em cadeias com $N \leq 80$, o valor de F está acima da

fidelidade máxima clássica, isto é, $F = 2/3 \approx 0.667$ [1, 2].

Figura 2.13: As barras representam a fidelidade máxima F da comunicação e a curva o emaranhamento máximo compartilhável como função de N ($N = [2, 80]$) em intervalo de tempo $[0, 400/J]$. Também temos que o tempo t_0 no qual este máximo é alcançado varia com N e a linha horizontal representa a maior fidelidade para uma transmissão clássica de um estado quântico [1, 2].



Fonte: Retirado de [1].

2.9 Concorrência

A *concorrência* é uma medida que mensura o emaranhamento entre duas partículas [88, 86]. A seguir, vamos obter a equação da *concorrência* para um sistema de nosso interesse. Para isso, consideramos o Hamiltoniano abordado da referência [89], que descreve um sistema de férmions não interagentes, dado por

$$H = \sum_{n=1}^N \varepsilon_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n - J \sum_{n=1}^{N-1} (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n) \quad , \quad (2.116)$$

onde \hat{c}_n^\dagger é o operador de criação e \hat{c}_n de aniquilação de uma partícula no n -ésimo sítio. Logo, a presença ou ausência de um férmion em um determinado sítio, é representado por um estado com spin para cima (*spin-up*) ou um spin para baixo (*spin-down*), respectivamente. Em seguida, empregando um estado arbitrário $|\psi\rangle$, que pode ser escrito como uma combinação linear de vetores $\{|i\rangle\}$ que formam uma base, ou seja,

$$|\psi\rangle = \sum_i w_i |i\rangle \quad , \quad (2.117)$$

onde w_i são os coeficientes e $|w_i|^2$ é a probabilidade de encontrar a partícula no i -ésimo sítio. Assim, o operador densidade é dado por

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_i \sum_j w_i w_j^* |i\rangle\langle j| \quad . \quad (2.118)$$

Para verificar o quanto emaranhado pode estar um par de spins, por exemplo i e j , devemos avaliar o operador densidade reduzido usando [1] a base $\{|0_i 0_j\rangle, |0_i 1_j\rangle, |1_i 0_j\rangle, |1_i 1_j\rangle\}$. Dessa maneira, a matriz densidade reduzida é

$$\rho_{i,j} = \begin{pmatrix} 1 - |w_i|^2 - |w_j|^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |w_i|^2 & w_i w_j^* & 0 \\ 0 & w_j w_i^* & |w_j|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.119)$$

Segundo o trabalho de W. K. Wothers [88], a *concorrência* de um estado bipartido de dois qubits, é dado por

$$C(\rho_{i,j}) = \max\{0, (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)\} \quad , \quad (2.120)$$

onde os $\{\lambda_i\}$ com $i = 1, 2, 3, 4$, são os autovalores, em ordem decrescente, da matriz hermitiana $R = \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$. Outro caminho mais fácil sugerido por W. K. Wothers [88] é encontrar as raízes quadradas dos autovalores $\{\lambda_i\}$'s da matriz não-hermitiana $\rho\tilde{\rho}$, portanto, cada λ_i é um número real positivo. Vamos inicialmente encontrar $\tilde{\rho}$, por meio de

$$\tilde{\rho} = (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y) \rho^* (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y) \quad , \quad (2.121)$$

onde ρ^* é complexo conjugado de ρ e $\hat{\sigma}^y$ é uma matriz de Pauli. Logo,

$$\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |w_j|^2 & w_i w_j^* & 0 \\ 0 & w_j w_i^* & |w_i|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - |w_i|^2 - |w_j|^2 \end{pmatrix} . \quad (2.122)$$

Em seguida, encontramos

$$\rho \tilde{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |w_i|^2 |w_j|^2 & 2|w_i|^2 w_i w_j^* & 0 \\ 0 & 2|w_j|^2 w_j w_i^* & |w_i|^2 |w_j|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad (2.123)$$

no qual seus autovalores são $\lambda_1 = 4|w_i|^2 |w_j|^2$ e $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 0$ em ordem decrescente. Substituindo os autovalores na equação (2.120), obtemos a equação da *concorrência*

$$C(\rho_{i,j}) = 2|w_i| |w_j| \quad , \quad (2.124)$$

que avalia a quantidade de emaranhamento compartilhada entre um par de spins. A *concorrência* assume valores entre 0 e 1, $C = 0$ quando o estado é não emaranhado e indicando a ausência de transferência de estado quânticos, $C = 1$ no caso em que o estado está maximamente emaranhado e indicando uma transferência de estados quântico perfeita. [88, 89].

CAPÍTULO 3

DINÂMICA ELETRÔNICA EM SISTEMAS
APERIÓDICOS 2D SOB EFEITO DE UM
CAMPO ELÉTRICO ESTÁTICO

3.1 Introdução

Neste capítulo, estudamos a propagação eletrônica em um sistema que apresenta aperiodicidade. Consideramos a dinâmica do elétron em uma rede quadrada, na qual os termos de hopping seguem uma distribuição aperiódica e sob a ação de um campo elétrico estático paralelo à rede. A fonte de aperiodicidade utilizada neste trabalho é semelhante à usada por Das Sarma, onde assumimos uma função senoidal cujas fases são proporcionais a uma lei de potência. O expoente da lei de potência controla o grau de aperiodicidade na rede. Nesse sistema, a evolução no tempo do pacote de onda é descrita pela equação de Schrödinger, onde soluções são encontradas usando um formalismo de Taylor. Os resultados numéricos sugerem que o sistema pode exibir uma rápida propagação de elétrons (propagação balística) dependendo do grau de aperiodicidade. Quando um campo elétrico estático é inserido no sistema, os cálculos revelam a existência de um comportamento oscilatório semelhante ao que ocorre em sistemas cristalinos (ou seja, oscilações de Bloch). Também investigamos a frequência, bem como o tamanho dessas oscilações, e comparamos os resultados obtidos com a abordagem semiclássica padrão usada em redes cristalinas.

3.2 Modelo e Formalismo

Considerando inicialmente o hamiltoniano de um modelo eletrônico com energias de hopping aperiódicas $t_{nm,jk}$ em uma rede retangular $N \times N$ [13, 75], dado por

$$H = \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} |n, m\rangle\langle n, m| + \sum_{\langle nm,jk \rangle} (t_{nm,jk} |n, m\rangle\langle j, k|), \quad (3.1)$$

onde $|n, m\rangle$ é um estado Wannier localizado no sítio (n, m) e $\sum_{\langle nm,jk \rangle}$ representa uma soma sobre os pares de vizinhos mais próximos. Em nossos cálculos, a energia on-site $\epsilon_{n,m}$ está relacionada à presença de um campo elétrico estático $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}} + E_y \hat{\mathbf{y}}$. A energia potencial do elétron interagindo com este campo elétrico é dada por

$$\epsilon_{n,m} = E_x \left(n - \frac{N}{2} \right) + E_y \left(m - \frac{N}{2} \right), \quad (3.2)$$

onde a carga do elétron e e o espaçamento da rede a foram considerados $e = a = 1$ [13]. Para gerar uma topografia de energia de hopping aperiódica, calculamos a seguinte função aperiódica 2D definida como [13, 49, 50, 43]

$$\zeta_{n,m} = W \cos(\pi\alpha n^\nu) \cos(\pi\alpha m^\nu), \quad (3.3)$$

onde W é uma constante, $\pi\alpha$ é um número racional e dentro da geometria 2D, $W < 4$ [13]. O expoente ν na equação (3.3) controla o grau de aperiodicidade dentro deste panorama 2D. A energia de hopping $t_{nm,jk}$ é dada por

$$t_{nm,jk} = \exp\{-|\zeta_{n,m} - \zeta_{j,k}|\}. \quad (3.4)$$

Ressaltamos que essa transformação exponencial gera um intervalo limitado da variável aperiódica sem alterar suas propriedades intrínsecas incomensuráveis, é basicamente um truque numérico implantado para garantir aperiodicidade na distribuição do termo fora da diagonal sem termos de hopping nulo. Destacamos que a escolha deste tipo de aperiodicidade apresenta uma grande vantagem em comparação com outras distribuições aperiódicas. O grau de aperiodicidade dentro desta função senoidal 2D pode ser ajustado por um único parâmetro ν . Para $\nu > 1$, estamos lidando com o limite pseudo-aleatório. Quando $\nu < 1$, temos um limite quase-periódico. Portanto, este procedimento permite a geração de vários tipos de potenciais aperiódicos. As amplitudes de Wannier evoluem no tempo de acordo com a equação de Schrödinger dependente do tempo ($\hbar = 1$) [13, 75]:

$$\begin{aligned} i \frac{dc_{n,m}(t)}{dt} &= \left[E_x \left(n - \frac{N}{2} \right) + E_y \left(m - \frac{N}{2} \right) \right] c_{n,m} + t_{nm,nm-1} c_{n,m-1}(t) \\ &+ t_{nm,nm+1} c_{n,m+1}(t) + t_{nm,n-1m} c_{n-1,m}(t) \\ &+ t_{nm,n+1m} c_{n+1,m}(t) \quad , \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde $n, m = 1, 2, \dots, N$. Na ausência de campo elétrico ($E_x = E_y = 0$), consideramos o elétron inicialmente localizado no sítio ($n_0 = N/2, m_0 = N/2$), isto é, $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m}(t=0) |n, m\rangle$, onde $c_{n,m}(t=0) = \delta_{n,n_0} \delta_{m,m_0}$. Para $E_x = E_y = E > 0$, definimos o estado inicial como um pacote de onda Gaussiano, então

$$c_{n,m}(t=0) = \frac{1}{A} \exp \left[\frac{-D(n, m)^2}{4} \right], \quad (3.6)$$

onde $D(n, m) = \sqrt{(n - n_0)^2 + (m - m_0)^2}$ e A é uma constante de normalização. O conjunto de equações (3.5) foi resolvido numericamente usando um método de alta ordem baseado na expansão de Taylor do operador de evolução [90], isto é

$$V(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{z_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}, \quad (3.7)$$

onde H é o hamiltoniano. A função de onda no tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t) |\Phi(t=0)\rangle$. O método pode ser usado recursivamente para obter a função de onda no tempo t . Com objetivo de obter $H^l |\Phi(t=0)\rangle$, usamos uma fórmula recursiva derivada da seguinte forma, considerando que $H^l |\Phi(t=0)\rangle = \sum_{nm} C_{n,m}^l |n, m\rangle$ e utilizando a fórmula hamiltoniana (3.7), calculamos $H^1 |\Phi(t=0)\rangle$ e também obtemos $C_{n,m}^1$ como

$$\begin{aligned} C_{n,m}^1 &= \left[E_x \left(n - \frac{N}{2} \right) + E_y \left(m - \frac{N}{2} \right) \right] c_{n,m}(t=0) + t_{nm, nm-1} c_{n, m-1}(t=0) \\ &+ t_{nm, nm+1} c_{n, m+1}(t=0) + t_{nm, n-1m} c_{n-1, m}(t=0) \\ &+ t_{nm, n+1m} c_{n+1, m}(t=0), \end{aligned} \quad (3.8)$$

De maneira análoga, usando $H^l |\Phi(t=0)\rangle = H \sum_{nm} C_{n,m}^{l-1} |n, m\rangle$, o $C_{n,m}^l$ pode ser obtido recursivamente como

$$\begin{aligned}
 C_{n,m}^l &= \left[E_x \left(n - \frac{N}{2} \right) + E_y \left(m - \frac{N}{2} \right) \right] C_{n,m}^{l-1} + t_{nm, nm-1} C_{n, m-1}^{l-1} \\
 &+ t_{nm, nm+1} C_{n, m+1}^{l-1} + t_{nm, n-1m} C_{n-1, m}^{l-1} \\
 &+ t_{nm, n+1m} C_{n+1, m}^{l-1},
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Os resultados sem presença de um campo elétrico podem ser obtidos adotando $\Delta t = 0.08$ e a soma foi truncada em $z_0 = 10$. Essa escolha foi suficiente para manter a conservação da norma da função de onda ao longo de todo o intervalo de tempo considerado. Na presença do campo elétrico, usamos $\Delta t = 0.01$ e $z_0 = 12$. Esse tipo de formalismo é mais rápido que os métodos de Runge-Kutta de alta ordem e fácil de implementar. Estamos particularmente interessados em calcular a posição média eletrônica definida como

$$\begin{aligned}
 R(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}) \cdot (\langle n(t) \rangle \hat{\mathbf{x}} + \langle m(t) \rangle \hat{\mathbf{y}}) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle n(t) \rangle + \langle m(t) \rangle),
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

onde $\langle n(t) \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N n |c_{n,m}(t)|^2$ e $\langle m(t) \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N m |c_{n,m}(t)|^2$. Também calculamos o desvio quadrático médio do pacote de ondas $\sigma(t)$, definido por [75]

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N [(n - n_0)^2 + (m - m_0)^2] |c_{n,m}(t)|^2}. \tag{3.11}$$

Lembrando que $\sigma(t)$ varia de 0, quando uma função de onda é confinada em um único sítio, a N , quando a função onda é uniformemente estendida por toda a cadeia.

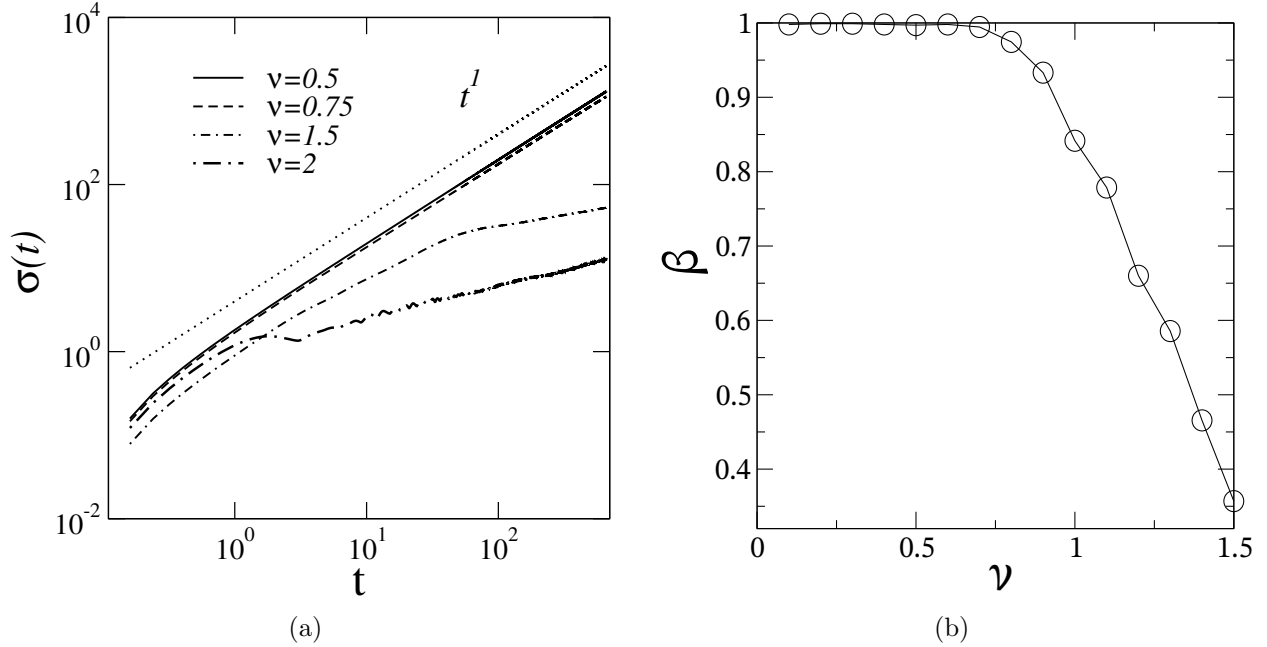
3.3 Resultados

Nossa primeira análise é realizada no caso de uma rede $N \times N$ com $N = 3000$,

$W = 3$ e sem a presença de campo elétrico, ou seja, $E_x = E_y = 0$. Por causa do tamanho do sistema, não resolvemos o conjunto de equações para todos os sítios, apenas para uma fração finita da rede em torno do centro da cadeia ($n_0 = N/2$ e $m_0 = N/2$). Esta subdivisão iniciou com o tamanho $N_0 \times N_0$ (com $N_0 = 100$) centrado em torno do sítio (n_0, m_0) . Sempre que o pacote de ondas chegava às fronteiras dessa pequena região, expandimos N_0 para evitar efeitos de borda. Este artifício acelera os cálculos numéricos e também remove a possibilidade de reflexões nas bordas.

Na Figura 3.1(a), plotamos nossos resultados para o desvio quadrático médio σ versus t para $E_x = E_y = 0$, $\pi\alpha = 0.5$ e $\nu = 0.5, 0.75, 1.5, 2$. Os resultados mostrados na Figura 3.1(a) indicaram que, para $\nu < 1$, a propagação da função de onda aumentou aproximadamente linearmente com o tempo (ou seja, $\sigma(t) \propto t^1$). É uma assinatura clara que existem estados estendidos neste limite. Em contraste, o cálculo para $\nu > 1$ mostrou que a evolução no tempo da largura da função de onda exibe uma dinâmica mais lenta, indicando a ausência de estados estendidos neste limite. Para analisar a transição localização-deslocalização dentro deste modelo, observamos o comportamento a longo tempo de σ conforme o ajuste do expoente ν . Para tempos longos, o desvio quadrático médio se comporta como $(\sigma \propto t^\beta)$, onde o expoente β depende de ν . Com objetivo obter a dependência entre β e ν , rodamos várias simulações numéricas considerando ν dentro do intervalo $[0.1, 1.5]$. Também consideramos vários valores para o parâmetro $\pi\alpha$ ($\pi\alpha = 0.2$ até 2.0).

Figura 3.1: (a) Desvio médio quadrático σ versus t para $E_x = E_y = 0$ e $\nu = 0.5, 0.75, 1.5, 2$. Os resultados indicam que para $\nu < 1$, a função de onda exibe aproximadamente uma propagação balística, ou seja, $\sigma(t) \propto t^\beta$ com $\beta \approx 1$. (b) O expoente β versus ν considerando ν dentro do intervalo $[0.1, 1.5]$, onde calculamos β utilizando $\pi\alpha = 0.2$ até 2.0.



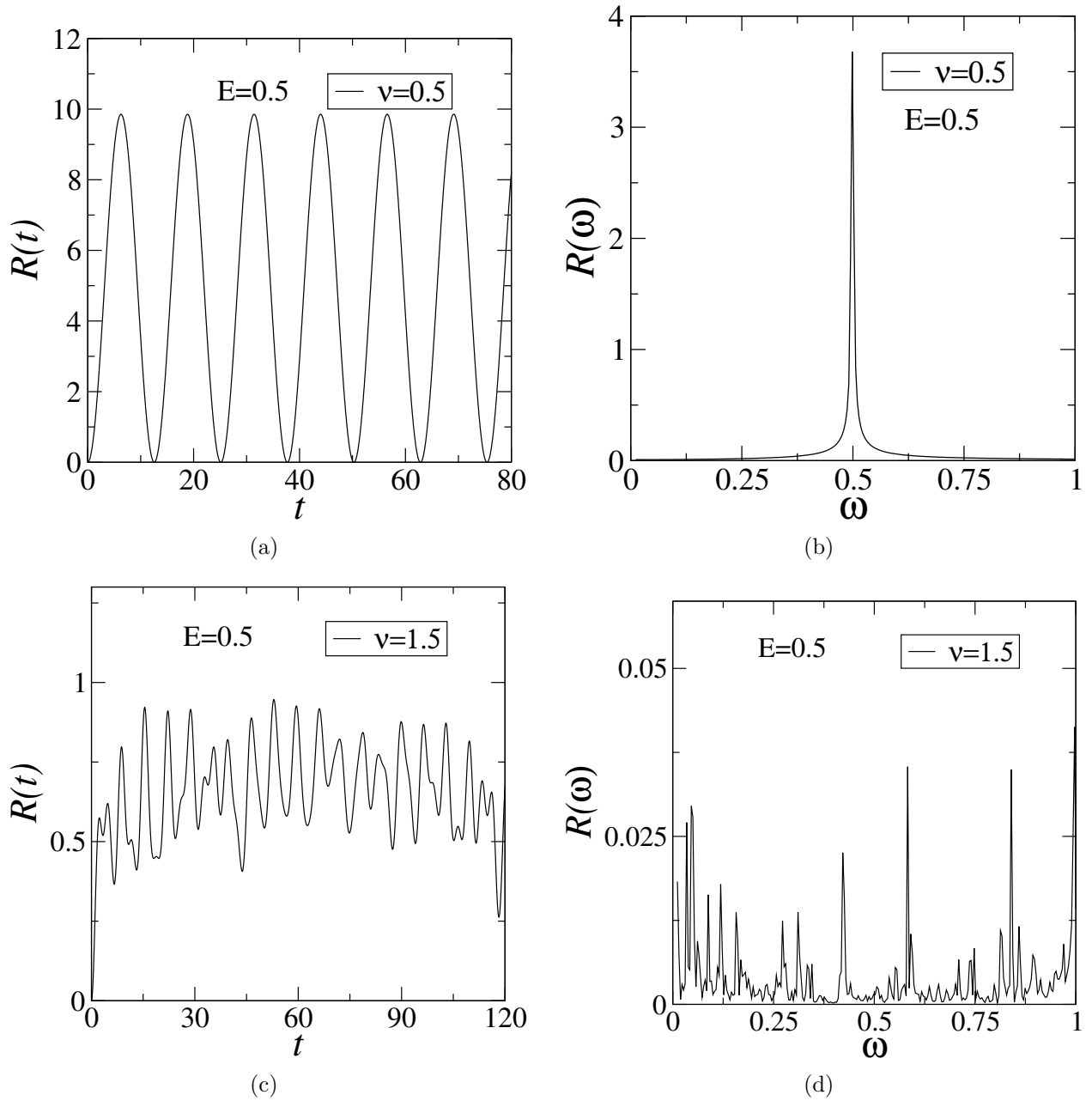
Fonte: Autor.

Figura 3.1(b) contém curva média de β versus ν obtida usando todos os cálculos. O expoente β foi calculado através de uma lei de potência adequada no limite de tempo longo. Os resultados mostrados na Figura 3.1(b) de fato confirmam que para $\nu < 1$, a dinâmica é balística (ou seja, o sistema apresenta estados estendidos). No entanto, dentro de nossa precisão numérica, o ponto crítico que separam os estados estendidos dos localizados é ligeiramente menor que $\nu = 1$. Com base na Figura 3.1(b), notamos que apenas para $\nu < 0.8$ a dinâmica parece ser realmente balística. Quando $\nu = 0.8$, o comportamento para tempo longo do desvio médio quadrático σ foi caracterizado por um expoente $\beta = 0.97(2)$. Para $\nu = 0.9$, obtemos $\beta = 0.94(2)$ e para $\nu = 1$, encontramos $\beta = 0.84(2)$. Portanto, para $0.8 \leq \nu \leq 1$, indicam uma dinâmica super-difusiva com expoente β entre 0.84 e 0.97. Ressaltamos que para o caso unidimensional (1D), investigado por Das Sarma e colaboradores, o ponto crítico que separa os estados estendidos dos localizados é $\nu = 1$. Dentro da estrutura de modelos bidimensionais (2D) com termos de hopping não periódico, essa tendência geral também foi encontrada de

maneira aproximada. Portanto, dentro da nossa precisão numérica computacional, o valor crítico encontrado é ligeiramente menor do que $\nu = 1$. Em geral, para $\nu < 1$ é encontrada uma dinâmica eletrônica rápida; no entanto, apenas para $\nu < 0.8$ que foi observada uma propagação realmente balística.

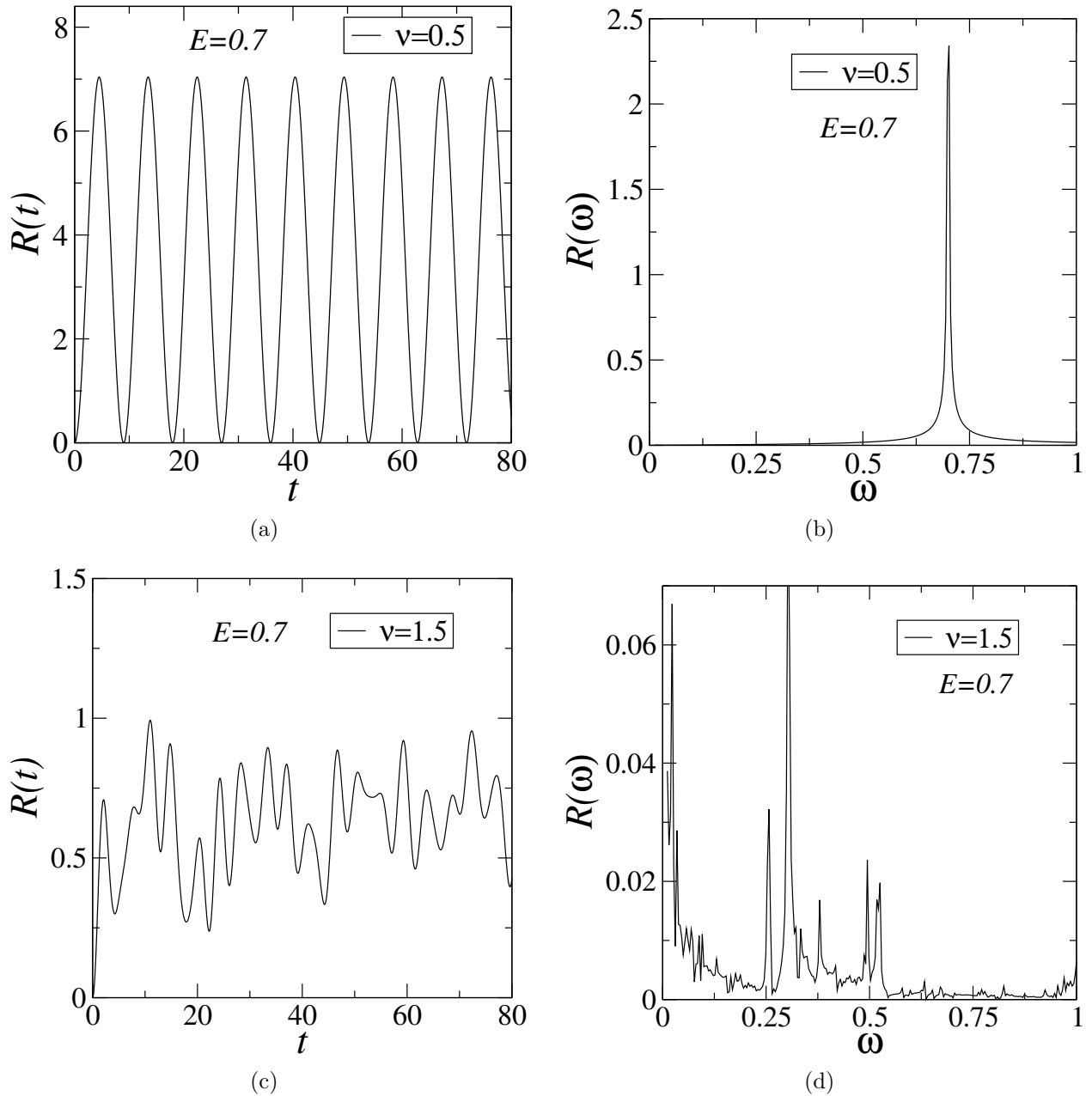
Vamos considerar agora o efeito de um campo elétrico estático paralelo à rede aperiódica (ou seja, $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}} + E_y \hat{\mathbf{y}}$) com $E_x = E_y = E$. Enfatizamos que, na presença de campo elétrico, o pacote de ondas permanece aprisionado em torno da posição inicial. Portanto, não é necessário considerar grandes sistemas. Para os casos com campo elétrico, consideramos uma rede $N \times N$ com $N = 300$, $\pi\alpha = 0.5$ e $W = 3$. O formalismo de Taylor foi considerado para resolver o conjunto de equações com $\Delta t = 0.01$ e $z_0 = 12$. Todos os cálculos com campo elétrico diferente de zero ($E \neq 0$) foram realizados para tempos até $t_{\text{máx}} = 2000$ e para melhorar a visualização da dinâmica do sistema, plotamos os dados para tempos curtos ($t \approx 100$). Nas Figuras 3.2 e 3.3, plotamos os cálculos numéricos principais considerando $E = 0.5$ e $E = 0.7$, respectivamente. Plotamos a posição média eletrônica em função do tempo para $E = 0.5$ e 0.7 com $\nu = 0.5$ e 1.5 , como mostra as Figuras 3.2(a),(c) e 3.3(a),(c), respectivamente. Para $\nu = 0.5$, podemos ver que para ambos os valores de E , o pacote de ondas eletrônico exibe um movimento oscilatório coerente com uma única frequência. Quando $\nu = 1.5$, observamos uma ausência completa de uma dinâmica coerente. A dinâmica oscilatória encontrada nas Figuras 3.2 e 3.3 para $\nu = 0.5$ é semelhante às “oscilações de Bloch”, originalmente definidas dentro da estrutura das redes cristalinas. Usando um formalismo semiclássico, [13, 91] é fácil provar que, em um sistema cristalino (ou seja, livre de desordens), um campo elétrico uniforme E causa a localização dinâmica do pacote de ondas. Além disso, a interação com o campo elétrico também dá origem a um movimento oscilatório denominado de oscilações de Bloch [13]. O procedimento semiclássico também fornece a frequência ω_E das oscilações eletrônicas, bem como o tamanho do segmento L_E sobre o qual o elétron mantém sua dinâmica: $\omega_E = E$ e L_E , onde consideramos unidades em que $e = \hbar = a = 1$.

Figura 3.2: (a), (c) Posição média eletrônica $R(t)$ versus t para $E_x = E_y = E = 0.5$ com $\nu = 0.5$ e 1.5. (b),(d) A transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω para os respectivos casos (a) e (b).



Fonte: Autor.

Figura 3.3: (a), (c) Posição média eletrônica $R(t)$ versus t para $E_x = E_y = E = 0.7$ com $\nu = 0.5$ e 1.5. (b),(d) A transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω para os respectivos casos (a) e (b).



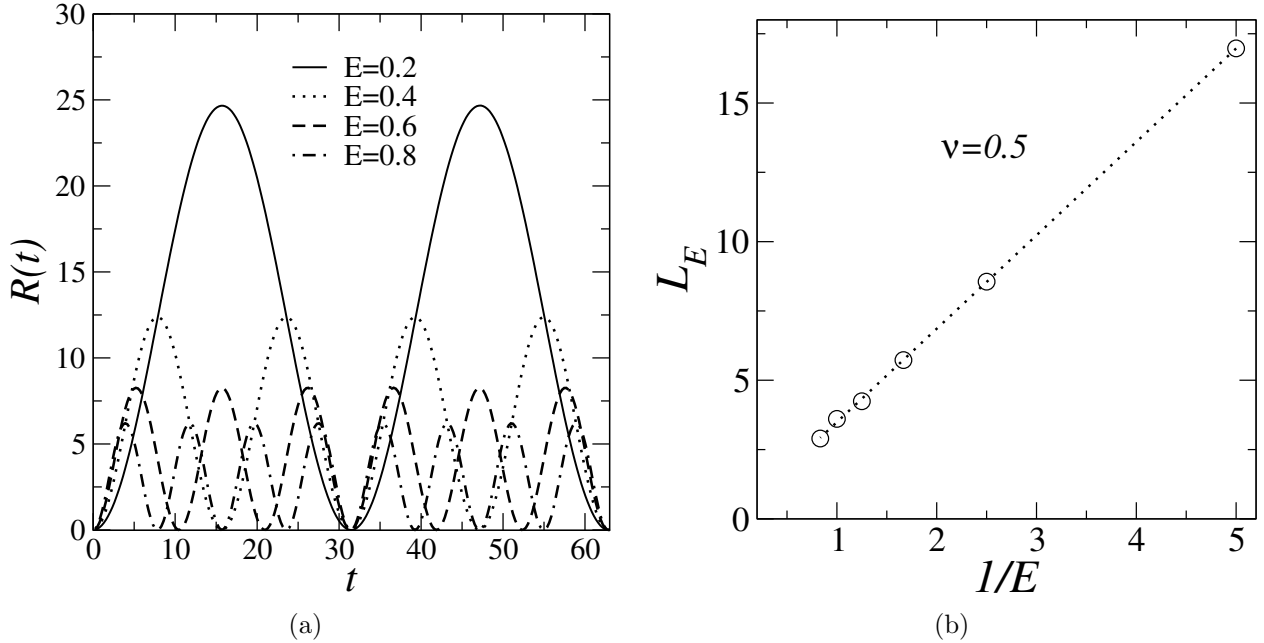
Fonte: Autor.

Calculamos a frequência de oscilação usando a transformada rápida de Fourier da função $R(t)$. Nossos resultados de $R(\omega)$ versus ω para $E = 0.5, 0.7$ e $\nu = 0.5, 1.5$, são encontrados nas Figuras 3.2(b),(d) e 3.3(b),(d). Notamos que, para $\nu = 0.5$, a transformada de Fourier

revelou um único pico bem definido em torno de $\omega = E$, que está de acordo com as previsões semiclássicas. Para $\nu = 1.5$, encontramos um amplo espectro de Fourier, indicando a ausência total de uma oscilação de Bloch coerente. Portanto, para $0 < \nu < 1$, nossos resultados sugerem de fato que o campo elétrico promove o aparecimento de “oscilações do tipo Bloch” com frequência em excelente concordância com as previsões semiclássicas.

Analisamos outros aspectos relacionados ao comportamento oscilatório encontrados nas Figuras 3.2, 3.3 e suas comparações com as previsões semiclássicas. Na abordagem semi-clássica, ocorre uma ampliação da teoria do elétron livre para a inclusão de um potencial que varia periodicamente no espaço. Por meio desse formalismo, a relação direta entre a frequência de oscilação e a intensidade do campo elétrico é estabelecida. Lembrando que a aplicação de um campo elétrico uniforme a uma rede periódica resulta na localização dinâmica de estados inicialmente estendidos de um elétron, desencadeando um comportamento oscilatório no pacote de ondas de elétrons, conhecido como “oscilações de Bloch” [91]. É interessante ressaltar que, devido ao aumento da intensidade do campo, a amplitude de oscilação diminui, ou seja, indicando estar em total acordo com a descrição semi-clássica. Na Figura 3.4, plotamos $R(t)$ versus t para $\nu = 0.5$, $\pi\alpha = 0.5$ e $E = 0, 2, 0.4, 0.6, 0, 8$. Observamos claramente que a amplitude do comportamento oscilatório diminui com o aumento da intensidade do campo elétrico (ver Figura 3.4(a)). Esses resultados obtidos parecem estar em consonância com os resultados semiclássicos. Para fazer uma comparação direta, estimamos o tamanho L_E para vários valores do campo elétrico E , como mostra a Figura 3.4(b). Para estimar o L_E , consideramos que $\langle n(t) \rangle$ e $\langle m(t) \rangle$ são aproximadamente idênticos e, portanto, o tamanho L_E pode ser obtido a partir de $L_E \approx (\sqrt{2}/2)R_{\text{máx}}$, onde $R_{\text{máx}}$ é o valor máximo de $R(t)$. O gráfico de L_E versus $1/E$ é encontrado na Figura 3.4(b), onde podemos ver de fato que $L_E \propto 1/E$ (novamente, em bom acordo com as previsões semiclássicas).

Figura 3.4: (a) $R(t)$ versus t para $\nu = 0.5$ e $E = 0, 2, 0.4, 0.6, 0.8$. (b) O tamanho L_E versus $1/E$ com $\nu = 0.5$.



Fonte: Autor.

Ressaltamos que, aplicando uma abordagem semiclássica ao sistema Bloch padrão, o tamanho L_E deve ser dado por $L_E = B/E$, onde B é a largura da banda de Bloch. No entanto, nosso modelo não é um sistema Bloch e a “banda de Bloch” não está bem definida aqui. Na referência [91], foi considerado uma relação aproximada generalizada $L_E = B^*/E$, onde B^* é a largura da banda de estados estendidos. Portanto, a grosso modo o ajuste linear dos dados, mostrados na Figura 3.4(b), forneceu a largura da banda de estados estendidos que existe em nosso modelo. Usando um ajuste linear $L_E = B^*(1/E) + a$, obtemos $B^* \approx 3$. No entanto, enfatizamos que não é uma estimativa precisa da largura da banda do estado estendido, porque tanto a estimativa numérica de L_E quanto a equação $L_E = B^*/E$ contêm aproximações, ver mais detalhes na referência [91]. Portanto, apesar das aproximações relacionadas ao tamanho da banda, nossos cálculos anteriores de fato sugerem a existência de uma banda de estados estendidos em sistemas bidimensionais (2D) com aperiódicidade fraca ($\nu < 0.8$) nos termos de hopping.

CAPÍTULO 4

TRANSPORTE DE CARGA EM SISTEMAS
DESORDENADOS BIDIMENSIONAIS COM
CAMPO ELÉTRICO EXTERNO

4.1 Introdução

Neste capítulo, estudamos a dinâmica eletrônica em uma rede quadrada com termos de hopping aleatórios correlacionados sob o efeito de um campo elétrico externo. Investigamos a dinâmica do pacote de onda, que está inicialmente localizada, usando o método de Taylor para resolver o conjunto de equações da dinâmica de Schrödinger. Primeiramente, na ausência de campo elétrico analisamos os efeitos da desordem com correlação na propagação eletrônica. Em seguida, investigamos os efeitos ao inserir um campo elétrico estático paralelo à rede bidimensional.

4.2 Modelo e Formalismo

Em nosso modelo consideramos um elétron movendo-se em uma rede retangular desordenada $N \times N$ sob o efeito de um campo elétrico. O hamiltoniano é escrito da seguinte forma

$$H = \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} |n, m\rangle\langle n, m| + \sum_{\langle n,m \rangle} (T_{n,m} |n, m\rangle\langle n, m+1| + Z_{n,m} |n, m\rangle\langle n+1, m|), \quad (4.1)$$

onde $|n, m\rangle$ é um estado de Wannier localizado no sítio (n, m) . Os termos $T_{n,m}$ e $Z_{n,m}$ representam os hopping longitudinal e transversal, respectivamente. A energia on-site $\epsilon_{n,m}$ está relacionado com um campo elétrico estático $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}} + E_y \hat{\mathbf{y}}$. Logo, a energia potencial do elétron interagindo com este campo elétrico é dada por

$$\epsilon_{n,m} = E_x \left(n - \frac{N}{2} \right) + E_y \left(m - \frac{N}{2} \right), \quad (4.2)$$

onde consideramos a carga do elétron e e o espaçamento da rede a igual a 1. A distribuição completa dos termos de hopping (ou seja, $N \times 2N$ termos) são geradas seguindo um perfil correlacionado $u_{i,j}$ dado por

$$u_{i,j} = \sum_{k,o} \frac{X_{k,o}}{\left(\frac{d_{i,j;k,o}}{A} + 1\right)^2} \quad , \quad (4.3)$$

onde $X_{k,o}$ são $N \times 2N$ números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo $[-0.5, 0.5]$. A quantidade $d_{i,j;k,o}$ é dado por $d_{i,j;k,o} = \sqrt{(i-k)^2 + (j-o)^2}$ e o parâmetro A ($0 < A \leq N$) controla o grau de correlação dentro do perfil $u_{i,j}$. Dessa forma, as energias de hopping longitudinal e transversal são dadas por

$$T_{n,m} = 0.5 \tanh(u_{n,2m}) + 1 \quad (4.4)$$

e

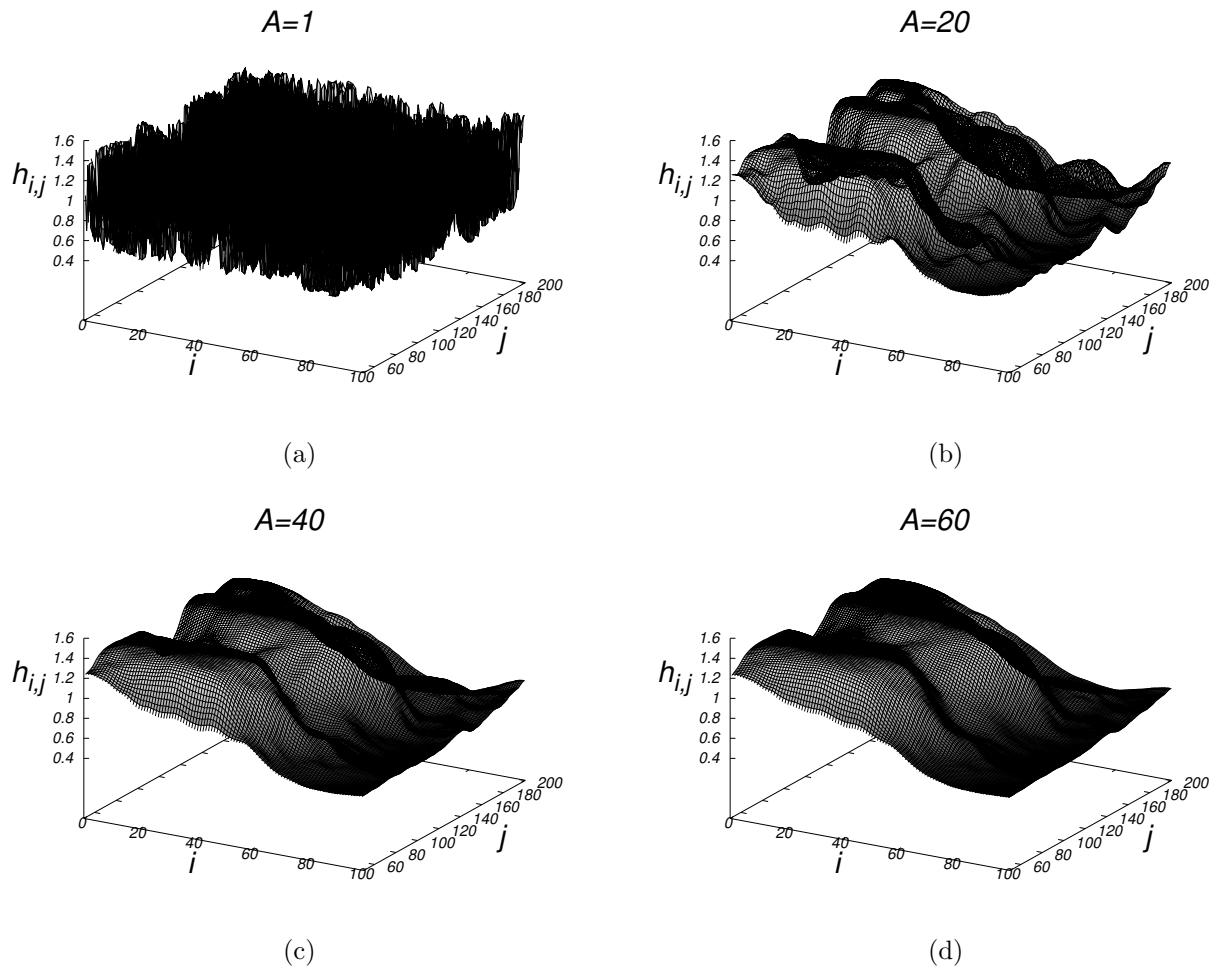
$$Z_{n,m} = 0.5 \tanh(u_{n,2m-1}) + 1 \quad , \quad (4.5)$$

onde essas duas equações (4.4) e (4.5) são um truque numérico que fornece números aleatórios correlacionados na distribuição fora da diagonal sem nenhum termo de hopping nulo. As Figuras 4.1(a-d) mostram a distribuição completa do hopping $h_{i,j} = 0.5 \tanh(u_{i,j}) + 1$ no plano $s(i, j)$. É possível observar que para $A = 1$, o hopping apresenta um perfil rugoso, enquanto que para $A = 20, 40, 60$, o perfil de distribuição do hopping é suavizado. A função de correlação intrínseca dentro da distribuição de hopping é dada por

$$C(r) = \frac{\langle h_{i,j} h_{k,o} \rangle - \langle h_{i,j} \rangle \langle h_{k,o} \rangle}{\langle h_{i,j}^2 \rangle - \langle h_{i,j} \rangle^2} \quad . \quad (4.6)$$

Na Figura 4.2, traçamos a função de correlação, onde podemos notar que à medida que o valor do grau de correlação A aumenta, o tamanho da região correlacionada também aumenta.

Figura 4.1: Perfil de hopping completo $h_{i,j}$ versus i e j para $A = 1, 20, 40, 60$.



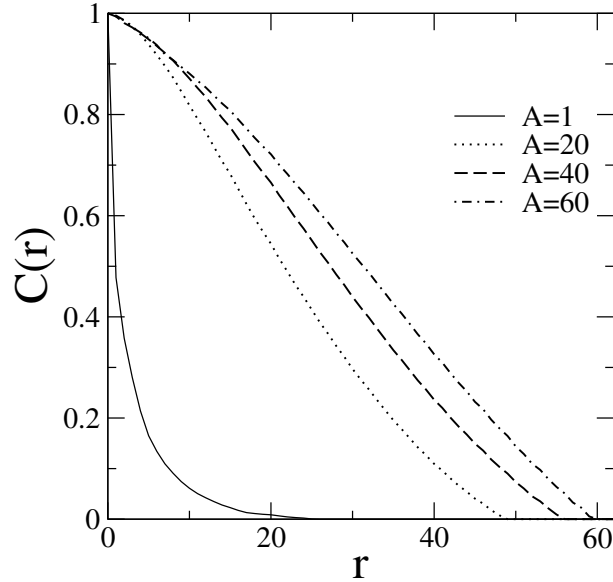
Fonte: Autor.

As amplitudes de Wannier evoluem no tempo conforme a equação de Schrödinger dependente do tempo dada por [13, 75]

$$\begin{aligned}
 i \frac{dc_{n,m}(t)}{dt} &= \left[E_x \left(n - \frac{N}{2} \right) + E_y \left(m - \frac{N}{2} \right) \right] c_{n,m} \\
 &+ T_{n,m-1} c_{n,m-1}(t) + T_{n,m} c_{n,m+1}(t) \\
 &+ Z_{n-1,m} c_{n-1,m}(t) + Z_{n,m} c_{n+1,m}(t) \quad , \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

onde $\hbar = 1$ e $n, m = 1, 2, \dots, N$.

Figura 4.2: A função de autocorrelação $C(r)$ versus r para os dados encontrados nas Figuras 4.1(a-d).



Fonte: Autor.

Em nossos cálculos, consideramos o estado inicial como um pacote Gaussiano dado por

$$c_{n,m}(t=0) = \frac{1}{\Pi} \exp \left[\frac{-K(n,m)}{4} \right] , \quad (4.8)$$

onde $K(n,m) = [(n - N/2)^2 + (m - N/2)^2]$ e Π é uma constante de normalização. A partir do método de alta ordem que se baseia na expansão de Taylor do operador de evolução temporal $U(\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{z_0} [(-iH\Delta t)^l]/l!$, encontramos numericamente as soluções do conjunto de equações (4.7) [90]. A função de onda no tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t) |\Phi(t=0)\rangle$. Para encontrar a função de onda no tempo t , basta aplicar o método de maneira recursiva.

Os resultados sem a presença de um campo elétrico podem ser encontrados usando $\Delta t = 0.1$ e a soma foi truncada em $z_0 = 10$. Para este caso, esses parâmetros foram os suficientes para manter a conservação da norma da função de onda ao longo de todo intervalo de tempo. Na presença do campo elétrico, com objetivo de manter a norma da função de onda adotamos $\Delta t = 0.01$ e $z_0 = 12$.

Na ausência de um campo elétrico, estamos particularmente interessados em encon-

trar o número de participação definido como

$$P(t) = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N |c_{n,m}(t)|^4} \quad , \quad (4.9)$$

onde o $P(t)$ varia de 1, quando a função de onda é confinada em único sítio, até a N^2 , quando a função de onda é uniformemente estendida por toda a rede [13, 92]. Além disso, investigamos a função de autocorrelação temporal definida como

$$\Theta(t) = \frac{1}{t} \int_0^t J(t) dt \quad , \quad (4.10)$$

onde $J(t) = \sum_{i,j} [c_{i,j}(t=0)c_{i,j}(t)]$ funciona como uma probabilidade de retorno generalizada. Para estados localizados, a autocorrelação temporal $\Theta(t)$ é aproximadamente uma constante. Enquanto que para estados estendidos a função de autocorrelação é $\Theta(t) \propto 1/t$.

Em seguida, investigamos a rede sob o efeito de um campo elétrico onde analisaremos a posição média eletrônica definida como

$$R(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle n(t) \rangle + \langle m(t) \rangle) \quad , \quad (4.11)$$

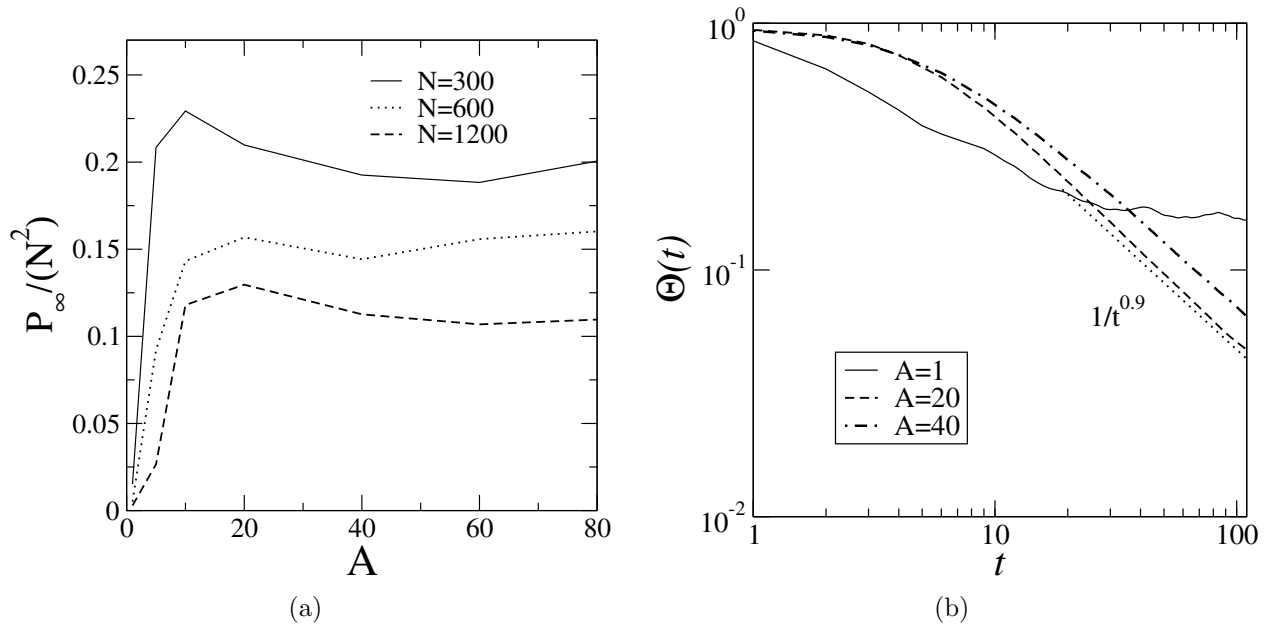
onde $\langle n(t) \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N n |c_{n,m}(t)|^2$ e $\langle m(t) \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N m |c_{n,m}(t)|^2$.

4.3 Resultados

Iniciamos exibindo os resultados para o caso sem a presença de um campo elétrico, ou seja, $E_x = E_y = E = 0$. Para resolver a equação de Schrödinger completa consideramos $N = 300$ até 1200. Devemos salientar que para tempos iniciais, não resolvemos o conjunto de equações para todos os $N \times N$ sítios. Em vez disso, consideramos uma fração finita de tamanho $L_0 \times L_0$ em torno do centro da rede, onde monitoramos o pacote de onda nas bordas dessa pequena região e expandimos L_0 até atingir $L_0 = N$. Este artifício é um truque numérico que acelera os cálculos e também exclui a possibilidade de reflexões nas bordas. Na Figura 4.3(a), mostramos o número de participação reescalado para tempo longo definido

como $P_\infty/N^2 = P(t \rightarrow t_{\text{máx}})/N^2$. Esta quantidade é aproximadamente uma constante independente de N , para estados estendidos. Enquanto que para estados localizados, o número de participação P_∞/N^2 vai para zero à medida que o tamanho do sistema aumenta. Em todos os casos considerados aqui, ou seja, na ausência de um campo elétrico, usamos $t_{\text{máx}} \approx 2N$. Podemos observar que o número de participação redimensionado de tempo longo P_∞/N^2 vai para zero à medida que o N aumenta. Este tipo de comportamento é uma assinatura clara de estados localizados no limite termodinâmico. Ressaltamos que a participação parece maior para $A > 1$. Logo, os resultados obtidos mostram que o número de participação se torna maior à medida que o valor de A aumenta. Também destacamos que P_∞ não é proporcional à área N^2 ; no entanto, seus grandes valores de fato sugerem que alguns autoestados contêm grandes comprimentos de localização (para $A \gg 1$). A Figura 4.3(b) mostra a função de autocorrelação temporal $\Theta(t)$, onde também observou-se um comportamento não usual. Podemos verificar que a autocorrelação temporal para A pequeno é aproximadamente uma constante, sugerindo estados localizados. No entanto, para $A = 20, 40$, observamos que $\Theta(t)$ se dispersa com $1/t^{0.9}$. Este resultado sugere que a probabilidade de retorno generalizada $J(t)$ apresenta algum decréscimo com o tempo, pelo menos dentro da escala de tempo em que podemos considerar. Esta fenomenologia está possivelmente relacionada com a topologia local de distribuição de hopping. Para entender melhor este ponto chave, calculamos a variância local Δ da distribuição de hopping. Para isso, dividimos o perfil de hopping $h_{i,j}$ em células de tamanho $x_0 \times x_0$. Calculamos a variância local Δ_m dentro de cada célula, onde m percorre todas as células. A quantidade Δ é definida como $\sum_m \Delta_m/N_c$, onde N_c é o número de células, para os cálculos consideramos $N = 100$, $x_0 = 10$ e $N_c = 200$.

Figura 4.3: (a) O número de participação redimensionado para tempo longo $P_\infty/N^2 = P(t \rightarrow \infty)/N^2$ versus A para $N = 300$ até 1200. (b) A função de autocorrelação temporal $\Theta(t)$ para $A = 1, 20, 40$.

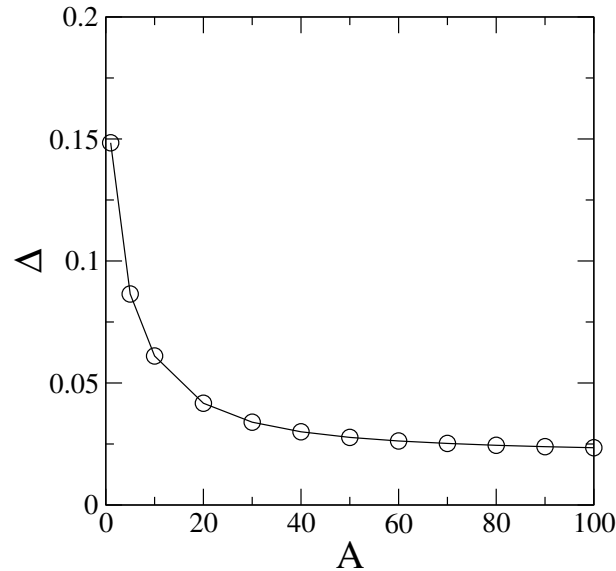


Fonte: Autor.

A Figura 4.4 mostra o gráfico de Δ versus A , no qual podemos observar que à medida que o valor de A aumenta, a quantidade Δ diminui. Portanto, conforme o grau de correlação A aumenta, a desordem local da distribuição de hopping se torna fraca. Ressaltamos que este efeito está relacionado ao alisamento do perfil de hopping que pode ser observado nas Figuras 4.1(a-d). No entanto, os cálculos obtidos do número de participação e da função de autocorrelação (temporal) indicam a presença de estados com grandes comprimentos de localização. A sequência correlacionada considerada aqui contém uma desordem local fraca que promove o aparecimento de modos fracamente localizados. Em alguns casos, esses estados com grande comprimento de localização podem na verdade ser estados críticos.

Na presença de um campo elétrico estático paralelo à rede, ou seja, $\mathbf{E} = E_x \hat{x} + E_y \hat{y}$ com $E_x = E_y = E$ os resultados obtidos podem ser resumidos nas Figuras 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8. Enfatizamos inicialmente que em rede cristalinas, um campo elétrico estático promove o surgimento de dinâmicas oscilatórias com frequência $\omega_E = E$, também conhecidas como “Oscilações de Bloch”. Além disso, o tamanho da região onde o pacote de onda fica

Figura 4.4: A variância local Δ da distribuição de hopping *versus* A , onde a desordem local diminui à medida que o valor de A aumenta.

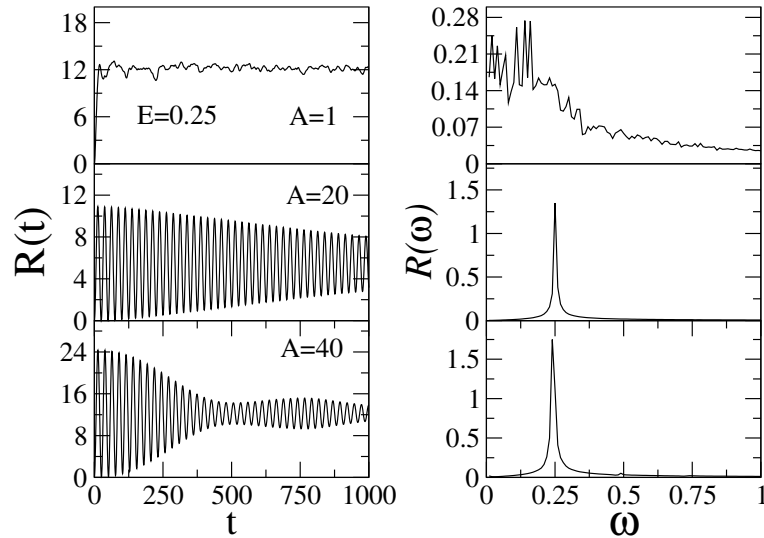


Fonte: Autor.

aprisionado aumenta à medida que o valor do campo elétrico diminui. Nas Figuras 4.5 e 4.6 obtemos (mais ou menos) um comportamento parecido para os casos em que $A = 20, 40$, onde observamos que o pacote de onda permanece aprisionado em torno da posição inicial e exibe uma dinâmica oscilatória com uma frequência de aproximadamente $\omega = E$. Para o caso em que $A = 1$, o potencial desordenado quase não correlacionado amortece a dinâmica oscilatória e a dinâmica coerente com uma única frequência está ausente. Portanto, os resultados para $A = 20, 40$ indicam oscilações semelhantes à de “Bloch” que são induzidas por essa desordem correlacionada. No entanto, é preciso ter cuidado com os dados para concluir a análise. Ressaltamos que mesmo para $A \approx N$ os estados estendidos estão ausentes. Para $A \gg 1$, os cálculos anteriores mostraram que esse modelo contém estados com grande comprimento de localização, mas ainda são estados localizados. Também mostramos que a desordem local diminui à medida que o valor de A aumenta. Portanto, os resultados obtidos na Figuras 4.5 e 4.6 não representam estados estáveis de Bloch, onde esse tipo de fenomenologia são válidos apenas para tempos iniciais. Para tempo longo, a desordem (mesmo fraca localmente) estará despejando a dinâmica oscilatória e promovendo uma dinâmica de localização sem coerência. Nas Figuras 4.5 e 4.6, não é tão fácil observar este ponto chave devido à intensidade do campo

elétrico.

Figura 4.5: Posição média eletrônica $R(t)$ versus (Figura à esquerda) e a transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω (Figura à direita), para $A = 1, 20, 40$ com $E = 0.25$, onde observamos que o pacote de onda permanece preso em torno da posição inicial e exibe uma dinâmica oscilatória com uma frequência de aproximadamente $\omega = E = 0.25$. Para $A = 1$, o potencial desordenado quase não correlacionado amortece a dinâmica oscilatória e a dinâmica coerente com uma única frequência está ausente.

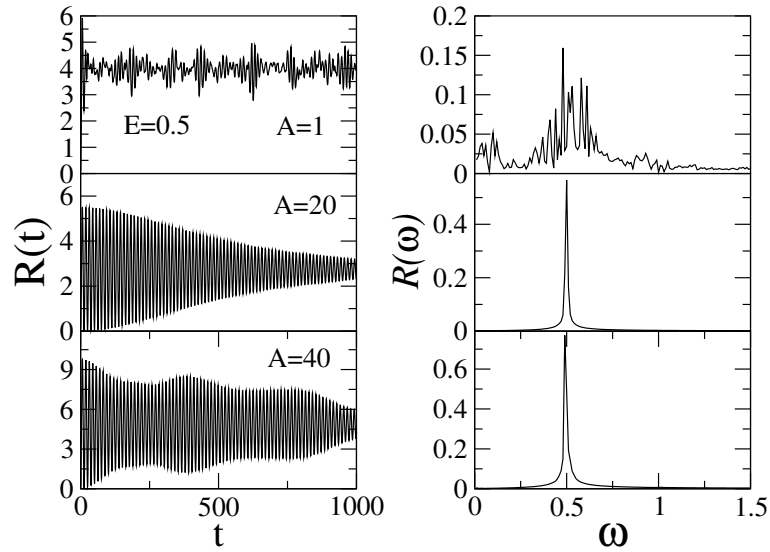


Fonte: Autor.

Para um campo elétrico intenso, o tamanho da região onde o pacote de onda está oscilando diminui e, portanto, o efeito de desordem é pequeno e o tempo para a destruição da oscilação aumenta muito. A análise da região em que o elétron permanece aprisionado pode ser encontrado na Figura 4.7, onde exibimos o número de participação normalizado $P_\infty/N^2 = P(t \rightarrow t_{\text{máx}})/N^2$ em função do campo elétrico E , onde considerando uma rede com $N = 1200$ sítios e o grau de correlação $A = 40$. Observamos claramente que o elétron permanece localizado em uma pequena região com poucos sítios para um forte campo elétrico.

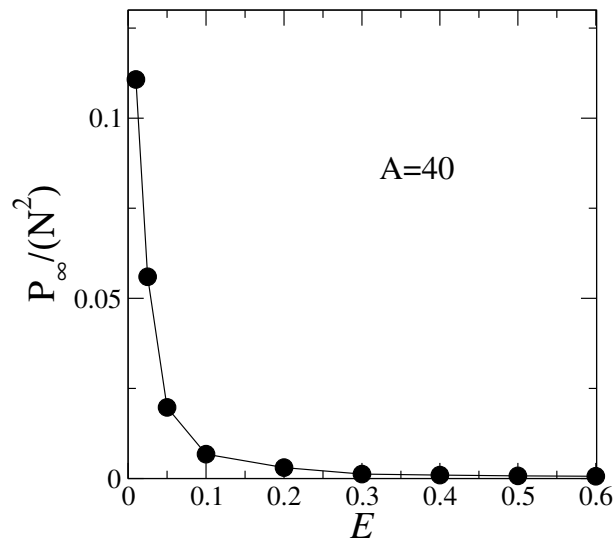
Por outro lado, o elétron pode se mover em uma grande região para um campo elétrico fraco. Portanto, para um campo mais fraco (por exemplo, $E = 0.1$) (ver Figura 4.8), podemos ver mais claramente o engano da fenomenologia oscilatória. Para um tempo longo, a desordem promove a diminuição do quadro oscilatório, e a dinâmica converge para uma dinâmica de localização padrão.

Figura 4.6: Posição média eletrônica $R(t)$ versus (Figura à esquerda) e a transformada de Fourier $R(\omega)$ versus ω (Figura à direita), para $A = 1, 20, 40$ com $E = 0.5$, onde observamos que o pacote de onda permanece preso em torno da posição inicial e exibe uma dinâmica oscilatória com uma frequência de aproximadamente $\omega = E = 0.5$. Para $A = 1$, o potencial desordenado quase não correlacionado amortece a dinâmica oscilatória e a dinâmica coerente com uma única frequência está ausente.



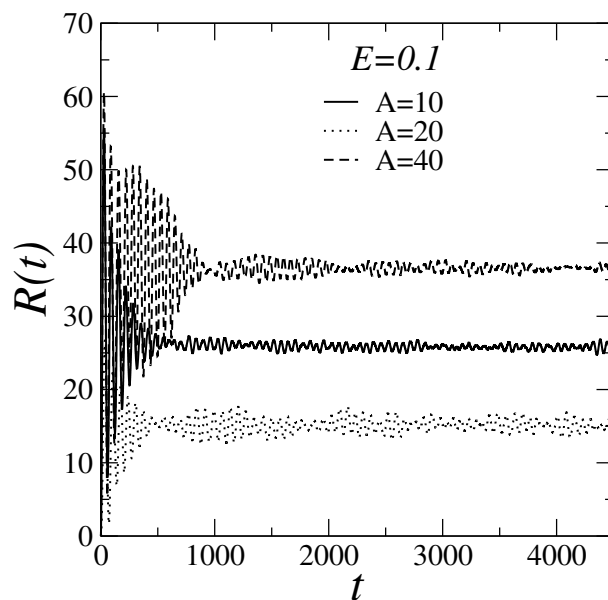
Fonte: Autor.

Figura 4.7: O número de participação redimensionado para tempo longo $P_\infty/N^2 = P(t \rightarrow \infty)/N^2$ versus E para $N = 1200$ $A = 40$.



Fonte: Autor.

Figura 4.8: A posição média $R(t)$ versus t para $E = 0.1$ e $A = 1, 20, 40$. Para tempo longo, a desordem promove a diminuição do quadro oscilatório, e as dinâmicas convergem para uma dinâmica padrão de localização.



Fonte: Autor.

CAPÍTULO 5

TRANSFERÊNCIA DE ESTADO
QUÂNTICO COM BOA FIDELIDADE EM
CADEIAS DESORDENADAS DO TIPO
DIAMANTE

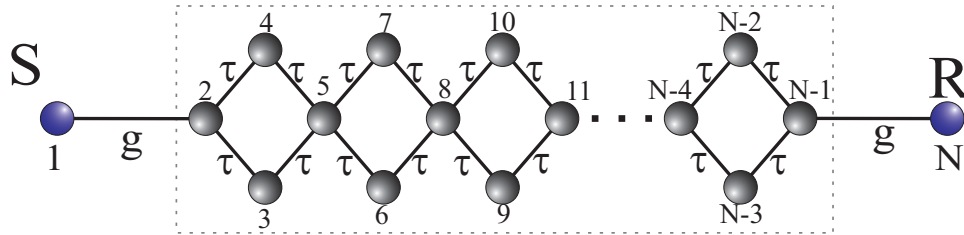
5.1 Introdução

Neste capítulo, investigamos a transferência de estados quânticos (QST) ao longo de uma cadeia tight-binding do tipo diamante com desordem na diagonal. No modelo, o canal está fracamente acoplado a um emissor e um receptor e os elementos diagonais deste canal apresentam uma distribuição de desordem não correlacionada com largura W . Usamos o método de diagonalização exata do hamiltoniano para obter numericamente os autovetores e autovalores e a partir destes calcular a *densidade de estados*, o *número de participação*, a *entropia de Shannon*, *fidelidade* e *concorrência*.

5.2 Modelo e Formalismo

Para investigar a transferência de estados quânticos vamos considerar um modelo que possui ao total N sítios, formados por um emissor (S) conectado a um receptor (R), através de um canal com topologia do tipo diamante com $N - 2$ sítios e que apresenta desordem não correlacionada na diagonal, como mostra a Figura 5.1. O g é o hopping de acoplamento do emissor (S) e do receptor (R) com o canal do tipo diamante, onde $g \ll \tau$. As energias on-sites ϵ_k dentro do canal tipo diamante são números aleatórios não correlacionados distribuídos uniformemente dentro do intervalo $[-W/2, +W/2]$, onde W é a largura de desordem. τ é o termo de hopping dentro do canal, no qual fizemos todos iguais a 1.

Figura 5.1: Representação pictórica do modelo. Os sítios 1 e N representam o emissor (S) e receptor (R), possuem energias locais ϵ_S e ϵ_R , respectivamente. O g é o hopping dos sítios 1 e N com o canal diamante. No canal os acoplamentos τ são todos iguais a 1 e as energias on-sites são números aleatórios não correlacionados dentro do intervalo $[-W/2, +W/2]$.



Fonte: Autor.

O hamiltoniano do modelo pode ser escrito da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_S |1\rangle\langle 1| + \epsilon_R |N\rangle\langle N| + g(|1\rangle\langle 2| + |N\rangle\langle N-1| + c.c) \\
 & + \sum_{k=2}^{N-1} \epsilon_k |k\rangle\langle k| + \sum_{\langle k,k'\rangle} \tau(|k\rangle\langle k'| + c.c) \quad , \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

onde os vetores kets $|1\rangle$ e $|N\rangle$ estão relacionados com emissor e receptor, respectivamente. As energias on-sites que representam o emissor S e o receptor R são ϵ_S e ϵ_R , onde fizemos $\epsilon_S = \epsilon_R = \varepsilon$. Os $\{|k\rangle\}$ são vetores kets e ϵ_k são as energias potenciais (distribuídas aleatoriamente) com $k = 2, \dots, N-1$, no interior do canal tipo diamante. O último termo do hamiltoniano (5.1) é um somatório ($\sum_{\langle k,k'\rangle}$) sobre os primeiros vizinhos do canal diamante conforme a Figura 5.1. Podemos reescrever o hamiltoniano (5.1) na sua forma matricial, para exemplificação tomamos $N = 9$. Logo, obtemos uma matriz 9×9 da seguinte forma:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_S & g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g & \epsilon_2 & \tau & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau & \epsilon_3 & 0 & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 & \epsilon_4 & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau & \tau & \epsilon_5 & \tau & \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & \epsilon_6 & 0 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 & \epsilon_7 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & \tau & \epsilon_8 & g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g & \epsilon_R \end{pmatrix} . \quad (5.2)$$

Em nosso modelo definimos $\tau = 1$ e $g \ll \tau$, ou seja, o emissor e o receptor estão fracamente acoplados ao canal. Para avaliar a eficiência da transferência de estado quântico do sítio 1 (emissor) até N (receptor), calculamos a função padrão da *fidelidade* (ver detalhes na seção 2.8) definida como [1, 2, 61] :

$$F(t) = \frac{1}{2} + \frac{|c_N(t)|}{3} + \frac{|c_N(t)|^2}{6} \quad , \quad (5.3)$$

onde $|c_N(t)|$ representa o módulo da função de onda no sítio N (receptor). Para calcular $c_N(t)$, precisamos resolver a equação de Schrödinger para Hamiltoniano completo que descreve modelo da seguinte maneira, primeiramente considerando um pacote de onda inicial $|\psi(t=0)\rangle = \sum_{k=1}^N c_k(t=0) |k\rangle$, onde $c_k(t=0) = \delta_{k,1}$ e usando o operador de evolução temporal $U(t) = e^{-iHt}$ (com $\hbar = 1$), o pacote de onda eletrônica no tempo t pode ser obtido através de $|\psi(t)\rangle = \sum_{k=1}^N c_k(t) |k\rangle = e^{-iHt} |\psi(t=0)\rangle$. Logo, função de onda eletrônica dependente do tempo no sítio k pode ser obtida a partir da equação a seguir

$$c_k(t) = \sum_j z_1^j z_k^j e^{-iE_j t} \quad , \quad (5.4)$$

onde $\{z_k^j\}$ e $\{E_j\}$ são os autovetores e os autovalores, respectivamente, do hamiltoniano (5.1).

Em nossos cálculos estamos interessados em computar a *fidelidade máxima*, ou seja, $F_{\text{máx}} = \text{máx}\{F(t)\}$, para isso usamos o intervalo de tempo $t \approx 4 \times 10^5$. Também calculamos a *concorrência* (ver detalhes na seção 2.9) definida como

$$C(t) = 2|c_1(t)c_N(t)| \quad . \quad (5.5)$$

De maneira similar à definida para *fidelidade máxima*, também computamos a *concorrência máxima* $C_{\text{máx}} = \text{máx}\{C(t)\}$.

5.3 Resultados

Primeiramente, fornecemos uma análise da natureza dos autoestados do canal do modelo considerado (5.1). Para esse propósito, diagonalizamos a matriz do Hamiltoniano e calculamos a densidade de estados, o número de participação e a entropia de Shannon. A *densidade de estado* $DOS(E)$ ¹ é o número de níveis da energia dentro de um intervalo

¹Sigla em inglês para *Density Of States*.

$E + \Delta E$, ou seja, é número de diferentes estados de um determinado nível de energia que elétrons podem ocupar [67]. Portanto, acaba nos fornecendo a largura do espectro de energia possíveis, isto é, a largura da banda de estados permitidos. A *densidade de estados* $DOS(E)$ é definida matematicamente como

$$DOS(E) = \sum_j \delta(E - E_j) \quad , \quad (5.6)$$

onde $\{E_j\}$ são os autovalores do hamiltoniano [67, 68]. O gráfico da $DOS(E)$ trata-se de um histograma do número de níveis de energia compreendidos dentro do intervalo de energia. O *número de participação* é definido como

$$P(E_j) = \left[\sum_k (z_k^j)^2 \right]^{-1} \quad , \quad (5.7)$$

onde $\{z_k^j\}$ representam os autovetores associado aos autovalores E_j . A expressão matemática para *entropia de Shannon* é dada por

$$S(E_j) = - \sum_k (z_k^j)^2 \ln [(z_k^j)^2] \quad , \quad (5.8)$$

onde também $\{z_k^j\}$ são os autovetores associados aos autovalores E_j . Para um estado perfeitamente deslocalizado (estendido), $S = \ln(N)$, enquanto que para um estado localizado, $S = 0$, onde a não dependência do tamanho do sistema implica a localização [74].

Em nossos experimentos numéricos, calculamos o número de participação e a entropia de Shannon sobre uma média com mais de 100 realizações distintas de desordem. Portanto, estamos na verdade calculando as médias do *número de participação* e da *entropia de Shannon*, que são dadas por

$$P(E) = \frac{\sum_{|E_j - E| < \Delta E} P(E_j)}{N_E} \quad (5.9)$$

e

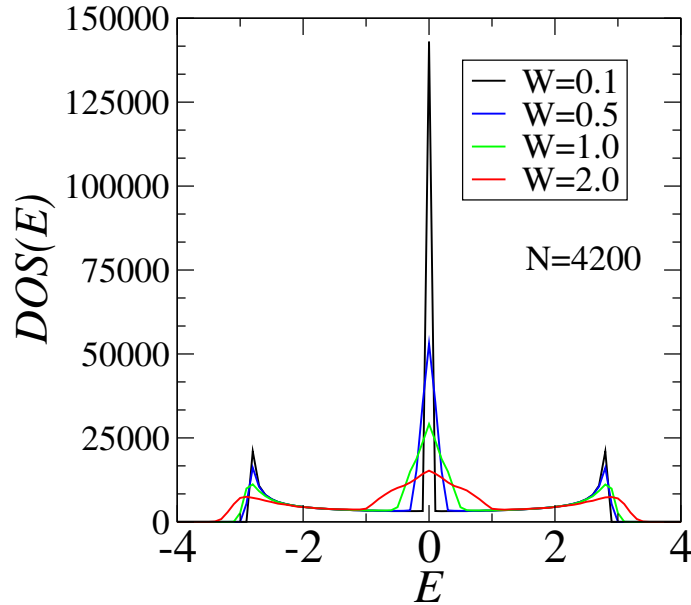
$$S(E) = \frac{\sum_{|E_j - E| < \Delta E} S(E_j)}{N_E} \quad , \quad (5.10)$$

respectivamente, com $\Delta E = 0.1$ e N_E é o número de estados com energia entre $E - \Delta E$ e $E + \Delta E$. Essa forma é uma maneira eficiente de obter os valores médios $P(E)$ e $S(E)$ em torno de uma dada energia E . Uma das vantagens desse tratamento matemático é que a medida obtida é uma função suave, que torna a análise de escala mais simples de ser realizada.

Ressaltamos que os cálculos da $DOS(E)$, $P(E)$ e $S(E)$ foram realizados considerando $\varepsilon = 0$, $\tau = 1$ e $g = 0.01$. Dessa forma, quando $g \ll \tau$, os sítios S (emissor) e R (receptor) são quase desacoplados, portanto, o comportamento da densidade de estados assim como $P(E)$ e $S(E)$ são dominadas apenas pela topologia do canal tipo diamante. A Figura 5.2 mostra a *densidade de estados versus E* , para as larguras de desordens $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 4200$ sítios. Para uma largura de desordem fraca $W = 0.1$, observamos um comportamento interessante de uma pseudo-singularidade próximas às bordas da banda de energia. É semelhante ao que acontece em cadeias cristalinas unidimensionais. A singularidade em torno de $E = 0$ está relacionado à conectividade dentro do canal do tipo diamante, onde alguns sítios contêm quatro vizinhos, comportamento similar ao encontrado em uma rede bidimensional, e outros sítios apresentam dois vizinhos. Os sítios com alta conectividade promovem o aparecimento de uma singularidade semelhante à exibida em uma rede bidimensional. À medida que a intensidade da desordem W aumenta, as pseudo-singularidades diminuem ainda mais e a largura da energia da banda aumenta. Esta é uma consequência nítida da total ausência de invariância translacional dentro do modelo desordenado.

Os resultados para o *número de participação* e da entropia de Shannon podem ser entendidos da seguinte forma, mesmo quando a largura de desordem é fraca ($W = 0.1$), tanto $P(E)$ quanto $S(E)$ aumentam à medida que o tamanho do sistema aumenta, como pode ser observado mais claramente nas Figuras 5.3(a), (b) e 5.4(a), (b). No entanto, mesmo no limite de desordem fraca, ou seja, $W \ll \tau$ as quantidades $P(E)$ e $S(E)$ não divergem com N e $\ln(N)$, respectivamente. Salientamos que devemos ter cuidados ao avaliar acerca da natureza dos autoestados, pois este crescimento observado não é definitivamente conclusivo a respeito da natureza (localizada ou deslocalizada) dos autoestados. Para analisar melhor esse comportamento calculamos o *número de participação médio* $\langle P \rangle$ versus o tamanho do sistema N , dentro de uma região de energia $|E| < 1$ e um largura de desordem fraca $W = 0.1$, como

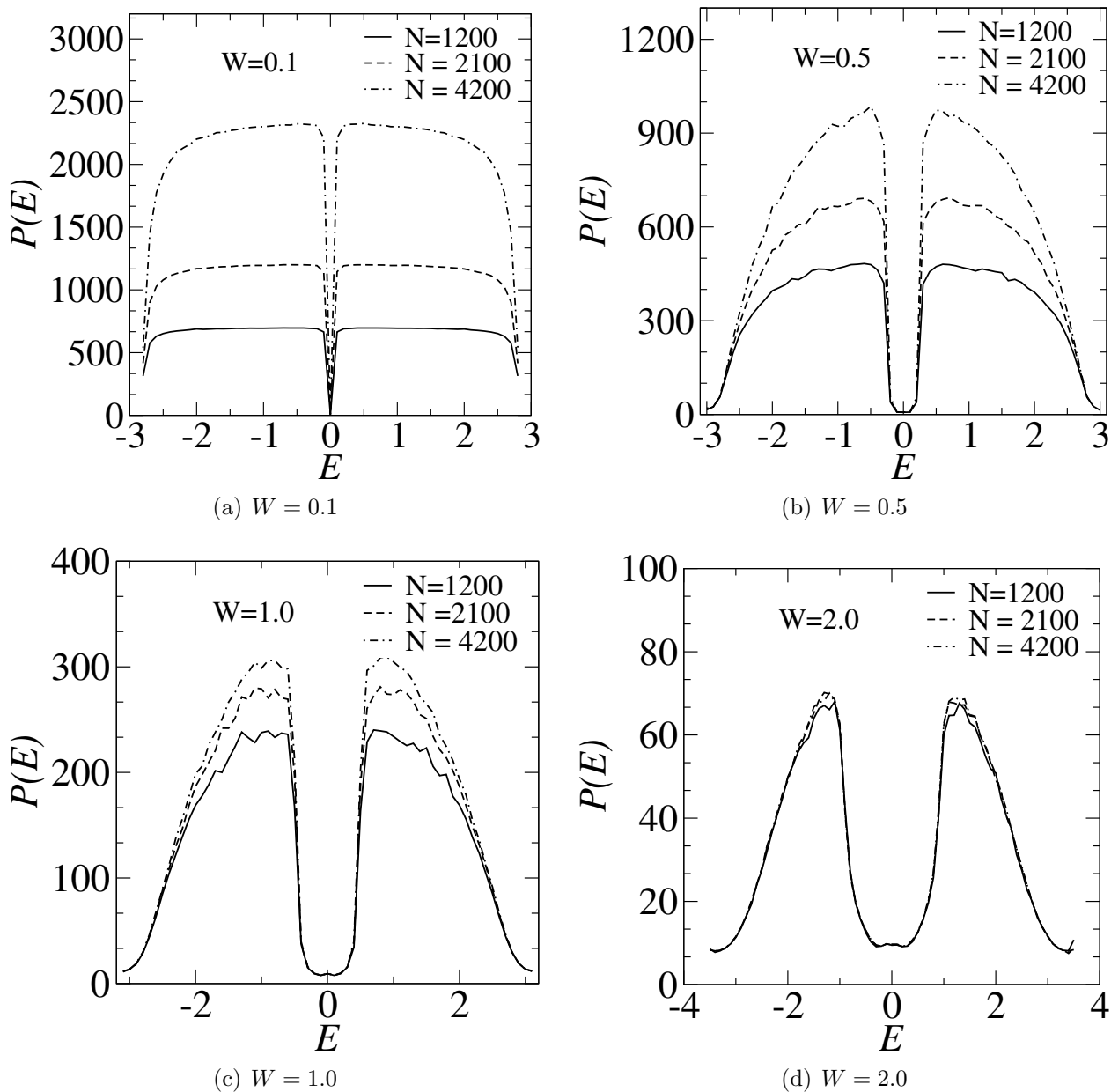
Figura 5.2: A densidade de estados (DOS) versus a energia E para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 4200$. A escala de energia em nosso modelo é o hopping médio efetivo ao longo do sistema completo, ou seja, aproximadamente $\tau = 1.0$.



Fonte: Autor.

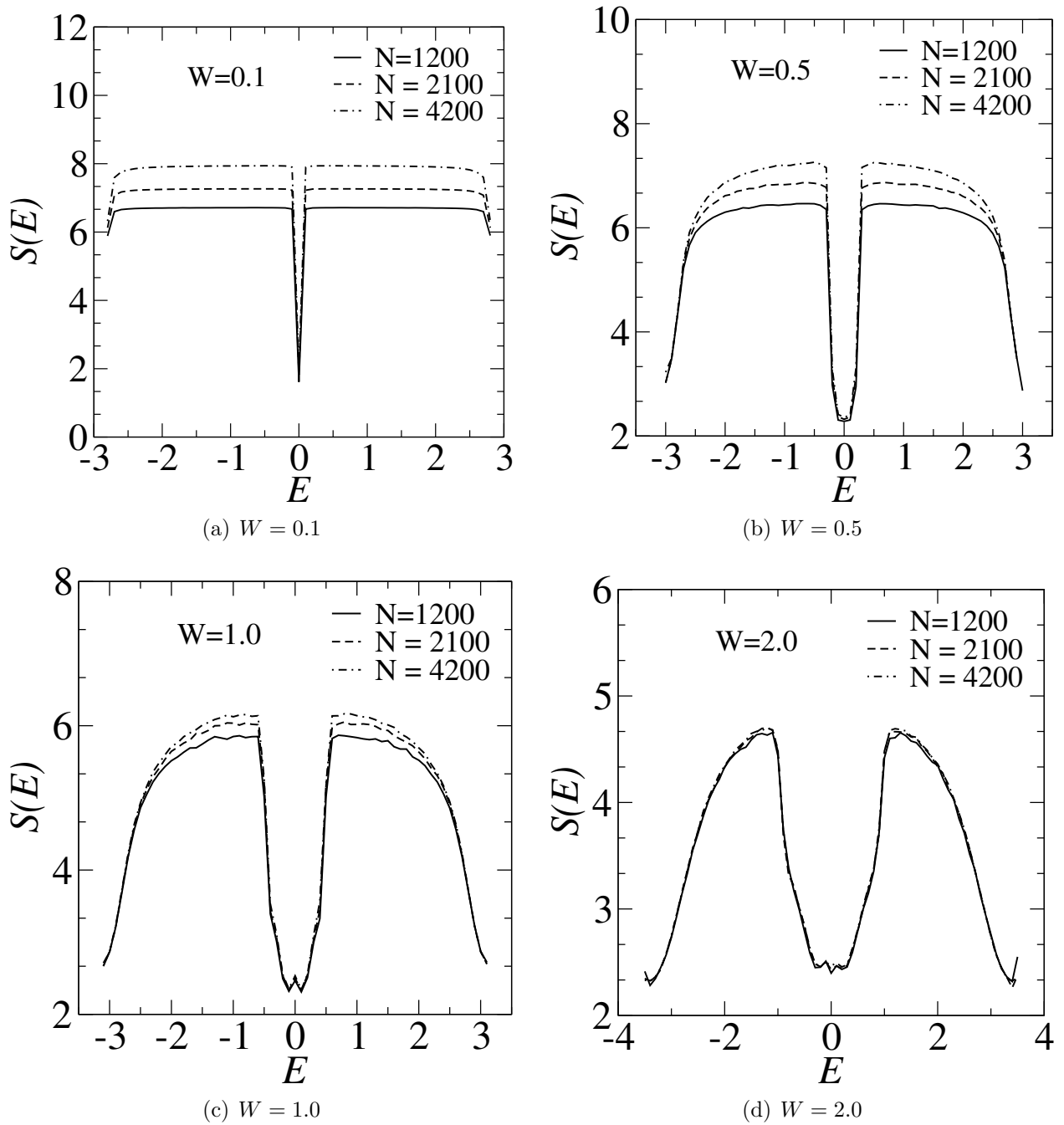
mostra a Figura 5.5. Este estudo foi feito considerando, inclusive tamanhos maiores do que os usados anteriormente ($N = 1200, 2100, 4200, 8400$). O ajuste dos pontos foi de $\langle P \rangle \propto N^{0.93(1)}$, demonstrando dessa forma que o número de participação de fato não diverge linearmente com o tamanho do sistema N , ou seja, indicando estados localizados. Também fizemos o mesmo cálculo para *entropia de Shannon* e novamente um comportamento localização foi encontrado ($\langle S \rangle \propto \ln(N^{0.94})$). Ressaltamos que estes resultados já eram esperados, pois são consequências oriundas da Teoria de Escala de Localização de Anderson no qual nos diz que para sistemas de baixa dimensionalidade os autoestados são localizados mesmo quando a desordem é fraca $W \ll \tau$.

Figura 5.3: (a-d) O número de participação $P(E)$ versus energia E para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 1200, 2100, 4200$.



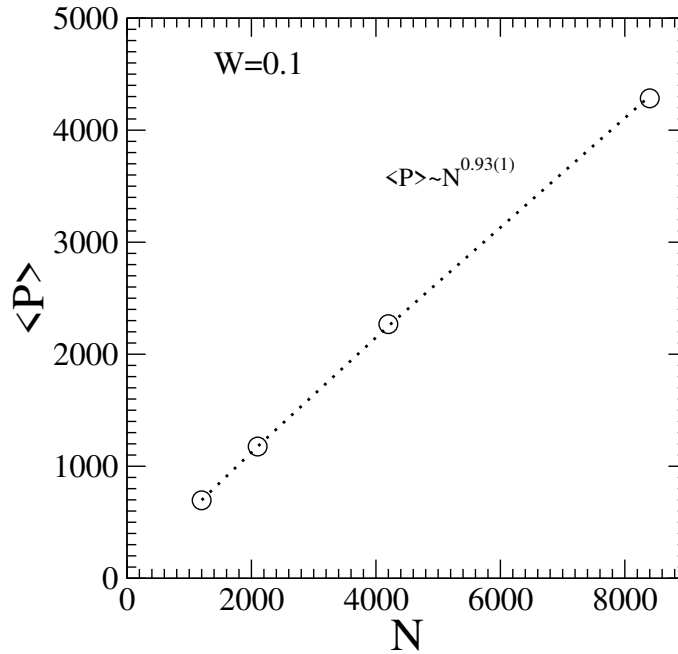
Fonte: Autor.

Figura 5.4: (a-d) A entropia de Shannon $S(E)$ versus energia E para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 1200, 2100, 4200$. Esse resultados estão em boa concordância com os mostrados na Figura 5.3, onde todos os autoestados permanecem localizados.



Fonte: Autor.

Figura 5.5: O número de Participação médio $\langle P \rangle$ versus N calculado para região de energia $|E| < 1$ e $W = 0.1$.



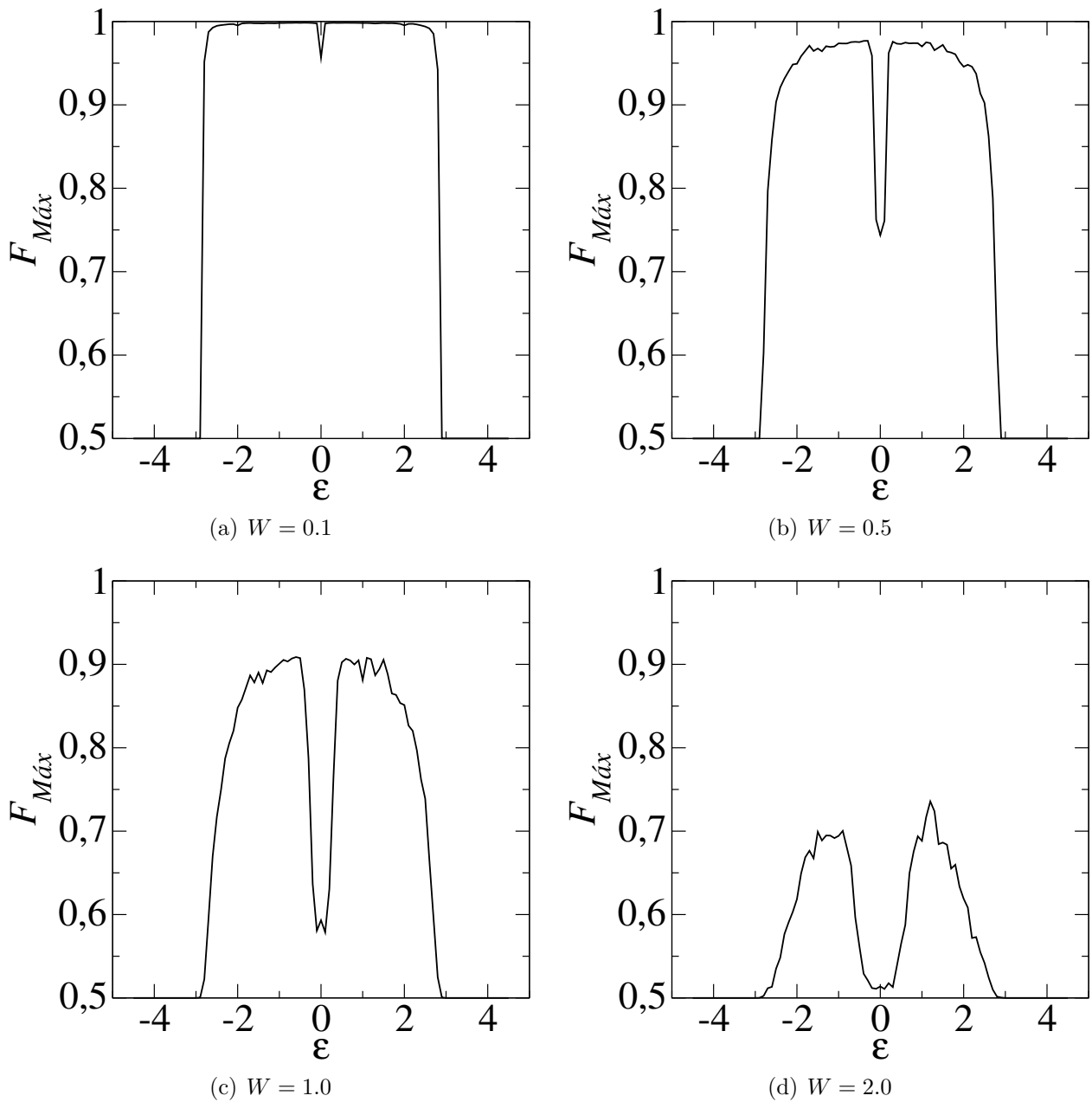
Fonte: Autor.

Quando aumentamos a intensidade de W , os resultados obtidos também mostraram que estão de acordo com a Teoria de Localização de Anderson, ou seja, todos os autoestados se tornam localizados. Chamamos atenção para o tamanho médio da função de onda para energias entorno do centro da banda no limite de $W \approx \tau$, onde observamos que em geral a função de onda, apesar de permanecer localizada, se espalhar em uma região finita com centenas de sítios (ver Figuras 5.3(c)). O mesmo ocorre para $W = 2$, a função de onda para essas energias ao redor do centro da banda pode se espalhar por cerca de aproximadamente sessenta sítios (ver Figuras 5.3(d)). Este tipo de comportamento pode ser interessante no âmbito da transferência de estados quânticos (QST) principalmente no limite de desordem fraca, que é nosso foco de estudo a seguir.

Depois de analisar a natureza dos autoestados do canal do tipo diamante vamos iniciar nossos estudos acerca QST. Nas Figuras 5.6(a-d), mostramos os resultados obtidos para fidelidade máxima versus ε para as larguras de desordem $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$ e $N = 120$. Ressaltamos que ε é a energia nos sítios S (emissor) e R (receptor). Também lembramos que

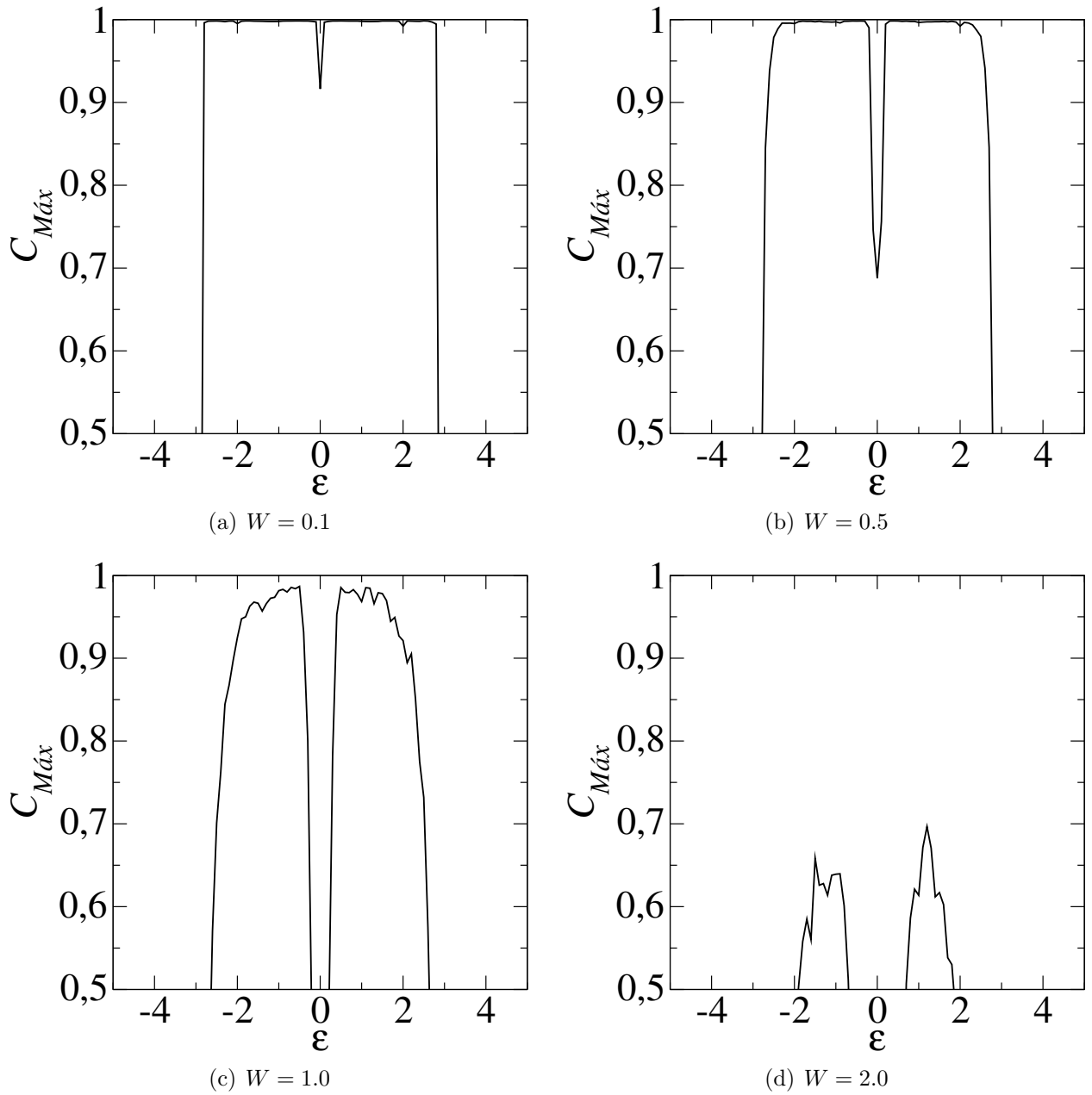
os cálculos foram feitos considerando $g = 0.01$, $\tau = 1$ e para um intervalo de tempo longo, onde aqui usamos 4×10^5 . Nossos cálculos mostraram que para intervalo de $0 < W < 1$, a *fidelidade máxima* fica acima de 0.94 indicando que a transferência de estados quântico pode ocorrer de forma eficiente dentro do modelo proposto, ou seja, com uma boa fidelidade, como mostram as Figuras 5.6(a) e (b). Note que nesta região de energia em torno de $|\varepsilon| < 1$ e valores de desordem $0 < W < 1$, estão aproximadamente na mesma região de energia em qual os nosso resultados mostraram que *número de participação* aumenta (ver Figuras 5.3(a) e (b)), ou seja, esta região do espectro de energia apresenta um grau de localização um pouco menor, favorecendo uma QST com uma boa fidelidade. Enquanto que para $W > 1$, a $F_{\text{máx}}$ diminui consideravelmente para valores abaixo de 0.75, indicando a ausência de transferência de estados quânticos, como mostram as Figuras 5.3(d). Estes valores indicam a impossibilidade da transferência de estados quânticos eficiente. As Figuras 5.7(a-d) mostram os resultados da *concorrência máxima* em função de ε , para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, $g = 0.01$, $\tau = 1$ e $N = 120$. Podemos observar que para $0 < W < 1$, a concorrência máxima é igual a 1 para determinadas faixas de energias ε (ver Figuras 5.7(a) e (b)), promovendo o emaranhamento máximo entre o emissor (S) e o receptor (R), indicando uma transferência de estados quânticos perfeita. Já para $W > 1$, a *concorrência máxima* diminuem significativamente, conseqüentemente o grau de emaranhamento entre emissor e receptor também diminui, apontando que não há transferência de estados quânticos perfeita. Estes resultados para $C_{\text{máx}}$ estão em boa concordância com os cálculos obtidos para fidelidade máxima para o mesmo valores de desordem.

Figura 5.6: (a-d) A fidelidade máxima *versus* ε para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, $g = 0.01$, $\tau = 1$ e $N = 120$. Para $0 < W < 1$, a $F_{\text{máx}}$ permanece acima de 0.94 indicando boa fidelidade para a transferência de estados quânticos. Para $W > 1$ a transferência de estado quântico está ausente.



Fonte: Autor.

Figura 5.7: (a-d) A concorrência máxima *versus* ε para $W = 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, $g = 0.01$, $\tau = 1$ e $N = 120$. Para $0 < W < 1$, a $C_{\text{máx}}$ é igual a 1 indicando o máximo emaranhamento entre o emissor e receptor. Para $W > 1$ a transferência de estado quântico está ausente.



Fonte: Autor.

CAPÍTULO 6

CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS

Neste trabalho apresentamos um estudo da propagação eletrônica em sistemas bidimensionais sob efeito de um campo elétrico estático e também investigamos a transferência de estados quânticos em um canal do tipo diamante. Iniciamos com uma revisão bibliográfica sobre Rede Cristalina, Teorema de Bloch, Modelo de Anderson, Teoria de Escala, Desordem com Correlações, Medidas do Grau de Localização, Efeito do Campo Elétrico, Introdução a Computação Quântica, Protocolo de Transferência de Estados Quânticos, Fidelidade e Concorrência.

Primeiramente, consideramos a dinâmica de elétrons em uma rede quadrada (2D) com termos de hopping distribuídos aperiodicamente e investigamos a evolução temporal de um pacote de ondas inicialmente localizada, usando um formalismo de Taylor para resolver o conjunto de equações de Schrödinger. Para o caso sem campo elétrico ($E_x = E_y = 0$), os resultados para $\nu < 1$ indicam que a propagação da função de onda aumentou linearmente com o tempo ($\sigma(t) \propto t^\beta$ com $\beta = 1$), ou seja, existem estados estendidos neste limite. Já para $\nu > 1$, a evolução do desvio quadrático médio no tempo exibe uma dinâmica mais lenta, indicando a ausência de estados estendidos neste limite. Analisamos a transição localização-deslocalização deste modelo observando o comportamento do desvio médio quadrático a longo tempo conforme o ajuste do expoente ν que controla o grau de aperiodicidade. Os resultados numéricos mostram que de fato, para $\nu < 1$ a dinâmica é balística, porém dentro de nossa precisão numérica o ponto crítico que separa os estados estendidos dos localizados é ligeiramente menor que $\nu = 1$. Em geral, para $\nu < 1$ é encontrado uma dinâmica eletrônica rápida, mas em nosso modelo (2D) apenas para $\nu < 0.8$ a dinâmica é realmente balística. Destacamos que, no caso unidimensional (1D) estudado por Das Sarma, o ponto crítico que distingue os estados estendidos dos localizados é $\nu = 1$. Em relação aos modelos bidimensionais (2D) com termos de hopping não periódico, observamos uma tendência semelhante, embora de forma aproximada, dentro da estrutura. Assim, dentro da precisão numérica computacional empregada, o ponto crítico observado é ligeiramente menor que $\nu = 1$. Em resumo, o sistema pode exibir uma rápida propagação de elétrons (propagação balística) dependendo do grau de aperiodicidade. Ao inserir um campo elétrico estático no sistema (2D), nossos cálculos

revelaram a existência de um comportamento oscilatório semelhante às oscilações de Bloch. Observamos que, para $\nu = 0.5$ e ambos os valores de campos ($E = 0.5$ e 0.7) o pacote de ondas eletrônico exibe um movimento oscilatório coerente e único pico de frequência bem definido em torno de $\omega = E$. Quando $\nu = 1.5$, podemos observar a ausência completa de uma dinâmica coerente. Portanto, para $0 < \nu < 1$, os resultados indicam que o campo elétrico promove o surgimento de “Oscilações do tipo Bloch”. Além disso, calculamos o tamanho da região em que o pacote de ondas permanece aprisionado. Observamos que a amplitude do comportamento oscilatório diminui quando a intensidade do campo elétrico aumenta e que o tamanho L_E é inversamente proporcional ao campo E . Os resultados apresentados estão de acordo com a abordagem semiclássica padrão.

Em seguida, investigamos a dinâmica de onda inicialmente localizado em uma rede quadrada com os termos de hopping com desordem correlacionada. Também utilizamos o método de Taylor, para obter as soluções da equação de Schrödinger. Os resultados, para $E_x = E_y = E = 0$ (sem campo elétrico), mostraram uma assinatura clara de estados localizados. Além disso, os cálculos do número de participação e da função de autocorrelação indicaram a presença de estados com grandes comprimentos de localização. Usando uma análise numérica da distribuição da desordem, mostramos que o aparecimento desses estados com grandes comprimentos de localização está relacionado com a suavização da desordem local. Quando um campo elétrico estático é inserido no sistema, o comportamento oscilatório semelhante às “oscilações de Bloch” é induzida por esse tipo de desordem correlacionada para um intervalo de tempo intermediário. Também calculamos as frequências dessas oscilações e mostramos que estão de acordo com os resultados previstos pela abordagem semi-clássica. Enfatizamos que a desordem promove uma diminuição na amplitude deste quadro oscilatório no limite de tempo longo. Conseqüentemente, a dinâmica converge para uma localização de dinâmica padrão. Mostramos numericamente que esta desordem correlacionada em sistema 2D não pode promover o aparecimento de estados estendidos ou oscilações de Bloch estáveis em um limite de tempo longo. O ponto principal por trás dessa fenomenologia é a existência de um comprimento de correlação efetivo típico, ou seja, o parâmetro A . À medida que o comprimento de correlação efetiva aumenta, dentro da distribuição de desordem, o comprimento de localização também aumenta, porém, este aspecto não é o suficiente para estabilizar

estados estendidos no sistema.

Por fim, estudamos a transferência de estados quânticos (QST) em uma cadeia do tipo diamante com desordem na diagonal. Consideramos um modelo no qual o emissor (S) e receptor (R) estão fracamente acoplados a um canal que apresenta uma distribuição de desordem não correlacionada. A partir do método de diagonalização exata do Hamiltoniano calculamos o número de participação, a entropia de Shannon, a fidelidade máxima e a concorrência máxima. Inicialmente, analisamos a natureza dos autoestados do canal. Para a densidade de estados com $W = 0.1$, observamos uma pseudo-singularidade nas extremidades da banda de energia, que é similar ao que ocorre em cadeias cristalinas 1D. Também observamos uma singularidade em torno de $E = 0$, que está ligado a conectividade do canal, onde alguns sítios contém quatro vizinhos e outros exibem dois vizinhos. Essa alta conectividade promove o surgimento de uma singularidade semelhante às que aparecem em redes bidimensionais. Quando aumentamos a intensidade de desordem W , as pseudo-singularidade diminuem e a largura da energia de banda aumenta. Os resultados para número de participação e da entropia de Shannon com $W = 0.1$ (desordem fraca), mostram que à medida que o tamanho do sistema aumenta, $P(E)$ e $S(E)$ também aumentam. Porém, mesmo no limite de desordem fraca ($W \ll \tau$) o número de participação e a entropia de Shannon não divergem com N e $\ln(N)$, respectivamente. Para investigar com mais cuidado este aspecto, obtemos o número de participação médio $\langle P \rangle$ versus N . Demonstramos que o número de participação de fato não diverge linearmente com N ($\langle P \rangle \propto N^{0.93(1)}$), indicando estados localizados. O mesmo cálculo foi realizado para entropia de Shannon ($\langle S \rangle \propto \ln(N^{0.94})$), apontando novamente um comportamento de localização. Também observamos que quando aumentamos a largura de desordem, os autoestados torna-se localizados. Mostrando que os resultados estão de acordo com a Teoria de Escala para Transição de Anderson. Além disso, notamos em geral que apesar da função de onda permanecer localizada, ela acaba se espalhando em uma região finita da cadeia. Os nossos resultados para fidelidade máxima com $0 < W < 1$, obtemos $F_{\text{máx}} > 0.94$ indicando que a transferência de estados quânticos pode ocorrer com boa eficiência. Já para $W > 1$, a fidelidade máxima diminui consideravelmente, indicando para este limite a ausência de transferência de estados quânticos. Da mesma forma, para $0 < W < 1$ a concorrência máxima é igual 1 para determinadas faixas de energia, promovendo

o emaranhamento máximo e indicando QST perfeita. Para $W > 1$ o grau de emaranhamento diminui consideravelmente, indicando ausência de QST perfeita.

Como perspectivas a partir deste trabalho, podemos investigar ainda mais a propagação de elétrons em sistemas de baixa dimensão com desordem e campos elétricos. Entender de fato o papel desempenhado pela desordem e campo elétrico na dinâmica desses sistemas. Além disso, estudar a transferência de estados quânticos (QST) em diferentes tipos de canais, como por exemplo, em um canal do tipo fita, ou seja, aumentando a dimensão do sistema. Compreender de forma geral como ocorre transferência de estados quânticos em diferentes tipos de canais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BOSE, S. Quantum communication through an unmodulated spin chain. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, n. 20, p. 1–4, 2003. ISSN 10797114.
- [2] BOSE, S. Quantum Communication through Spin Chain Dynamics: an Introductory Overview. *Contemp. Phys.*, v. 48, n. 1, p. 13–30, feb 2008. ISSN 00107514. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/0802.1224> <http://dx.doi.org/10.1080/00107510701342313>>.
- [3] MACIÁ, E. *Aperiodic Structures in Condensed Matter: Fundamentals and Applications*. [S.l.]: CRC Press, 2008. ISBN 142006827X,9781420068276.
- [4] MACIÁ, E.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Physical nature of critical wave functions in fibonacci systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 76, n. 16, p. 2957–2960, 1996. ISSN 10797114.
- [5] MACIÁ, E. Exploiting aperiodic designs in nanophotonic devices. *Reports Prog. Phys.*, v. 75, n. 3, 2012. ISSN 00344885.
- [6] WALTER, S.; SCHNEBLE, D.; DURST, A. C. Bloch oscillations in lattice potentials with controlled aperiodicity. *Phys. Rev. A - At. Mol. Opt. Phys.*, v. 81, n. 3, p. 3–7, 2010. ISSN 10502947.
- [7] MOURA, F. A. de et al. Bloch oscillations in an aperiodic one-dimensional potential. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, v. 71, n. 10, p. 1–6, 2005. ISSN 10980121.

- [8] MOURA, F. A. de; VIANA, L. P.; FRERY, A. C. Vibrational modes in aperiodic one-dimensional harmonic chains. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, v. 73, n. 21, p. 2–5, 2006. ISSN 10980121.
- [9] SUKHORUKOV, A. A. Enhanced soliton transport in quasiperiodic lattices with introduced aperiodicity. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, n. 11, p. 2–5, 2006. ISSN 00319007.
- [10] DAI, C. M.; WANG, W.; YI, X. X. Dynamical localization-delocalization crossover in the Aubry-André-Harper model. *Phys. Rev. A*, v. 98, n. 1, p. 1–12, 2018. ISSN 24699934.
- [11] XIE, X. C.; SARMA, S. D. “Extended” electronic states in a Fibonacci superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, v. 60, 1988.
- [12] SARMA, S. D.; XIE, X. C. Conductance fluctuations in one-dimensional quasicrystals. *Phys. Rev. B*, v. 37, n. 3, 1988.
- [13] MOURA, F. A. de et al. Bias driven coherent carrier dynamics in a two-dimensional aperiodic potential. *Phys. Lett. Sect. A Gen. At. Solid State Phys.*, v. 372, n. 44, p. 6694–6700, 2008. ISSN 03759601.
- [14] CADEZ, T.; MONDAINI, R.; SACRAMENTO, P. D. Dynamical localization and the effects of aperiodicity in Floquet systems. *Phys. Rev. B*, v. 96, n. 14, p. 1–9, 2017. ISSN 24699969.
- [15] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; MAKAROV, N. M. Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder. *Phys. Rep.*, Elsevier B.V., v. 512, n. 3, p. 125–254, 2012. ISSN 03701573. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2011.11.002>>.
- [16] LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. V. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, v. 57, n. 2, p. 287–337, 1985. ISSN 00346861.
- [17] RIVAS, D.; SZAMEIT, A.; VICENCIO, R. A. Rogue waves in disordered 1D photonic lattices. *Sci. Rep.*, Nature Publishing Group UK, v. 10, n. 1, p. 1–8, 2020. ISSN 20452322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-020-69826-x>>.

- [18] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958. ISSN 0031899X.
- [19] EVERS, F.; MIRLIN, A. D. Anderson transitions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 80, n. 4, p. 1355–1417, 2008. ISSN 00346861.
- [20] WHITE, D. H. et al. Observation of two-dimensional Anderson localisation of ultracold atoms. *Nat. Commun.*, Springer US, v. 11, n. 1, p. 1–8, 2020. ISSN 20411723. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/s41467-020-18652-w>>.
- [21] Da Silva, L. D. et al. One-electron propagation in Fermi, Pasta, Ulam disordered chains with Gaussian acoustic pulse pumping. *Int. J. Mod. Phys. C*, v. 28, n. 8, p. 14–16, 2017. ISSN 01291831.
- [22] ABRAHAMS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, n. 10, p. 673–676, 1979. ISSN 00319007.
- [23] MORAIS, P. A. et al. Geometrical and Anderson transitions in harmonic chains with constrained long-range couplings. *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, v. 84, n. 4, p. 1–6, 2011. ISSN 15393755.
- [24] SALES, M. O.; De Moura, F. A. Numerical study of the one-electron dynamics in one-dimensional systems with short-range correlated disorder. *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures*, Elsevier, v. 45, p. 97–102, 2012. ISSN 13869477. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2012.07.014>>.
- [25] ALBUQUERQUE, S. S.; De Moura, F. A.; LYRA, M. L. Vibrational modes in harmonic chains with diluted disorder. *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, v. 357, n. 1, p. 165–172, 2005. ISSN 03784371.
- [26] De Moura, F. A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. *Eur. Phys. J. B*, v. 66, n. 2, p. 165–169, 2008. ISSN 14346028.
- [27] De Moura, F. A. Vibrational modes in a two-dimensional aperiodic harmonic lattice. *J. Phys. Condens. Matter*, v. 22, n. 43, 2010. ISSN 09538984.

- [28] SALES, M. O. et al. Absorption spectra and level spacing statistics in a ternary alloy with an ornstein-uhlenbeck disorder distribution. *Int. J. Mod. Phys. C*, v. 25, n. 2, p. 1–12, 2014. ISSN 01291831.
- [29] MOURA, F. A. de; LYRA, M. L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, n. 17, p. 3735–3738, 1998. ISSN 10797114.
- [30] BELLANI, V. et al. Experimental evidence of delocalized states in random dimer superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, n. 10, p. 2159–2162, 1999. ISSN 10797114.
- [31] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, n. 20, p. 4062–4065, 1999. ISSN 10797114.
- [32] WU, H. L.; PHILLIPS, P. Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.*, v. 66, n. 10, p. 1366–1369, 1991. ISSN 00319007.
- [33] PHILLIPS, P.; WU, H. L. Localization and its absence: A new metallic state for conducting polymers. *Science (80-.)*, v. 252, n. 5014, p. 1805–1812, 1991. ISSN 00368075.
- [34] KUHL, U. et al. Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Appl. Phys. Lett.*, v. 77, n. 5, p. 633–635, jul 2000. ISSN 0003-6951. Disponível em: <<http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.127068>>.
- [35] PENG, C.-K. et al. Long-range correlations in nucleotide sequences. *Nature*, v. 356, n. 6365, p. 168–170, mar 1992. ISSN 0028-0836. Disponível em: <<http://www.nature.com/articles/356168a0>>.
- [36] ROCHE, S. Sequence Dependent DNA-Mediated Conduction. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, n. 10, p. 1–4, 2003. ISSN 10797114.
- [37] LOTFALLAHZADEH, S. et al. Localization in the Anderson model with long-range correlated hopping and on-site disorders. *Waves in Random and Complex Media*, v. 25, n. 1, p. 9–17, 2015. ISSN 17455049. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/17455030.2014.954316>>.

- [38] NARAYAN, O.; MATHUR, H.; MONTGOMERY, R. Evading Anderson localization in a one-dimensional conductor with correlated disorder. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 103, n. 14, p. 1–6, 2021. ISSN 24699969.
- [39] DÍAZ, E. et al. Evidence of weak Anderson localization revealed by the resistivity, transverse magnetoresistance and Hall effect measured on thin Cu films deposited on mica. *Sci. Rep.*, Nature Publishing Group UK, v. 11, n. 1, p. 1–10, 2021. ISSN 20452322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-021-97210-w>>.
- [40] MAFI, A.; BALLATO, J. Review of a Decade of Research on Disordered Anderson Localizing Optical Fibers. *Front. Phys.*, v. 9, n. November, p. 1–11, 2021. ISSN 2296424X.
- [41] KOHLERT, T. et al. Observation of Many-Body Localization in a One-Dimensional System with a Single-Particle Mobility Edge. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 122, n. 17, p. 170403, 2019. ISSN 10797114. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.170403>>.
- [42] LÜSCHEN, H. P. et al. Single-Particle Mobility Edge in a One-Dimensional Quasiperiodic Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 120, n. 16, p. 160404, 2018. ISSN 10797114. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.160404>>.
- [43] LI, X.; LI, X.; Das Sarma, S. Mobility edges in one-dimensional bichromatic incommensurate potentials. *Phys. Rev. B*, v. 96, n. 8, p. 1–18, 2017. ISSN 24699969.
- [44] JIANG, H. et al. Interplay of non-Hermitian skin effects and Anderson localization in nonreciprocal quasiperiodic lattices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 100, n. 5, p. 54301, 2019. ISSN 24699969. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.054301>>.
- [45] DENG, X. et al. One-Dimensional Quasicrystals with Power-Law Hopping. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 123, n. 2, p. 25301, 2019. ISSN 10797114. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.025301>>.

- [46] WANG, P. et al. Localization and delocalization of light in photonic moiré lattices. *Nature*, Springer US, v. 577, n. 7788, p. 42–46, jan 2020. ISSN 0028-0836. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/s41586-019-1851-6> <http://www.nature.com/articles/s41586-019-1851-6>>.
- [47] LI, X.; Das Sarma, S. Mobility edge and intermediate phase in one-dimensional incommensurate lattice potentials. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 101, n. 6, p. 1–16, 2020. ISSN 24699969.
- [48] SZABÓ, A.; SCHNEIDER, U. Mixed spectra and partially extended states in a two-dimensional quasiperiodic model. *Phys. Rev. B*, v. 101, n. 1, p. 1–10, 2020. ISSN 24699969.
- [49] Das Sarma, S.; HE, S.; XIE, X. C. Mobility Edge in a Model One-Dimensional Potential. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, n. 18, p. 2144–2147, oct 1988. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2144>>.
- [50] Das Sarma, S.; HE, S.; XIE, X. C. Localization, mobility edges, and metal-insulator transition in a class of one-dimensional slowly varying deterministic potentials. *Phys. Rev. B*, v. 41, n. 9, p. 5544–5565, 1990. ISSN 01631829.
- [51] FLICKER, F.; Van Wezel, J. One-Dimensional Quasicrystals from Incommensurate Charge Order. *Phys. Rev. Lett.*, v. 115, n. 23, p. 1–5, 2015. ISSN 10797114.
- [52] MATSUZAKI, Y. et al. One-way transfer of quantum states via decoherence. *J. Phys. Soc. Japan*, The Physical Society of Japan, v. 89, n. 4, p. 44003, 2020.
- [53] HERMES, S. et al. Dimensionality-enhanced quantum state transfer in long-range-interacting spin systems. *Phys. Rev. A*, APS, v. 101, n. 5, p. 53607, 2020.
- [54] GUALDI, G. et al. Perfect state transfer in long-range interacting spin chains. *Phys. Rev. A*, APS, v. 78, n. 2, p. 22325, 2008.
- [55] ALMEIDA, G. M. A.; LYRA, M. L.; MOURA, F. A. B. F. de. Transmission of quantum states through disordered channels with dimerized defects. *Quantum Inf. Process.*, Springer, v. 18, n. 11, p. 350, 2019.

- [56] APOLLARO, T. J. G. et al. Spin chains for two-qubit teleportation. *Phys. Rev. A*, APS, v. 100, n. 5, p. 52308, 2019.
- [57] REN, F.-H.; WANG, Z.-M.; GU, Y.-J. Quantum state transfer through a spin chain in two non-Markovian baths. *Quantum Inf. Process.*, Springer, v. 18, n. 6, p. 1–11, 2019.
- [58] WANISCH, D.; FRITZSCHE, S. Driven spin chains as high-quality quantum routers. *Phys. Rev. A*, APS, v. 102, n. 3, p. 32624, 2020.
- [59] KAY, A. Perfect, efficient, state transfer and its application as a constructive tool. *Int. J. Quantum Inf.*, World Scientific, v. 8, n. 04, p. 641–676, 2010.
- [60] LORENZO, S. et al. 2-qubit quantum state transfer in spin chains and cold atoms with weak links. *Int. J. Quantum Inf.*, World Scientific, v. 15, n. 05, p. 1750037, 2017.
- [61] ALMEIDA, G. M. et al. Localization properties and high-fidelity state transfer in hopping models with correlated disorder. *Ann. Phys. (N. Y.)*, Elsevier Inc., v. 398, p. 180–189, 2018. ISSN 1096035X. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.aop.2018.09.003>>.
- [62] D'ANGELIS, F. M. et al. Fast and robust quantum state transfer in a topological Su-Schrieffer-Heeger chain with next-to-nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. Res.*, APS, v. 2, n. 3, p. 33475, 2020.
- [63] OLIVEIRA, I. S.; De Jesus, V. L. B. *Introdução à Física do Estado Sólido*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.
- [64] KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 8. ed. [S.l.]: Grupo Gen-LTC, 2006.
- [65] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Física do Estado Sólido*. [S.l.]: Cengage Learning, 2011.
- [66] DIAS, W. d. S. *Dois elétrons Interagentes em Cadeias Cristalinas e Aperiódicas: Efeitos de Campo Elétrico*. 103 p. Tese (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal de Alagoas, 2007.

- [67] DIAS, W. d. S. *Propriedades de Transporte em Sistemas de Baixa Dimensionalidade na Presença de Interação*. 159 p. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal de Alagoas, 2011.
- [68] DUTRA, R. F. et al. *Elementos da Teoria da Localização de Anderson*. Maceió: eBook Kindle, 2020. 86 p. ISBN 978-65-00-01651-2.
- [69] MOURA, F. A. B. de. *Transição de Anderson em Sistemas de Baixa Dimensionalidade com Desordem Correlacionada*. 151 p. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2003.
- [70] MANDELBROTT, B. B.; NESS, J. W. V. Fractional brownian motions, fractional noises and applications. *Ness Source SIAM Rev.*, v. 10, n. 4, p. 422–437, 1968.
- [71] FOX, C. G. Empirically derived relationships between fractal dimension and power law form frequency spectra. *Pure Appl. Geophys. PAGEOPH*, v. 131, n. 1-2, p. 211–239, 1989. ISSN 00334553.
- [72] DUNLAP, D. H.; KENKRE, V. M. Effect of scattering on the dynamic localization of a particle in a time-dependent electric field. *Phys. Rev. B*, v. 37, n. 12, p. 6622–6631, apr 1988. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.37.6622>>.
- [73] KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. *Reports Prog. Phys.*, v. 56, p. 1469–1564, 1993.
- [74] ROY, N.; RAMACHANDRAN, A.; SHARMA, A. Interplay of disorder and interactions in a flat-band supporting diamond chain. *Phys. Rev. Res.*, American Physical Society, v. 2, n. 4, 2020. ISSN 26431564.
- [75] MOURA, F. A. de et al. Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Europhys. Lett.*, v. 66, n. 4, p. 585–591, 2004. ISSN 02955075.
- [76] NUNES, D. M.; RANCIARO NETO, A.; DE MOURA, F. A. Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder. *J.*

- Magn. Magn. Mater.*, Elsevier, v. 410, p. 165–170, 2016. ISSN 03048853. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.03.026>>.
- [77] Analia E. Zwick. *Quantum State Transfer in Spin Chains*. 1–131 p. Tese (Tese de Doutorado) — Universidad Nacional de Córdoba, 2012.
- [78] NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2010. ISBN 9781139495486. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=-s4DEy7o-a0C>>.
- [79] MCMAHON, D. *Quantum computing explained*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2007.
- [80] BOUWMEESTER, D.; ZEILINGER, A. *The physics of quantum information*. [S.l.]: Springer, 2000. 1–326 p.
- [81] JONES, J. A.; JAKSCH, D. *Quantum Information, Computation and Communication*. [S.l.: s.n.], 2012. 1–210 p. ISBN 978-1-107-01446-6.
- [82] PATHAK, A. *Elements of Quantum Computation and Quantum Communication*. [S.l.: s.n.], 2013. 1–338 p. ISBN 9781466517929.
- [83] VENEGAS-ANDRACA, S. E. *Quantum walks for computer scientists*. Morgan & Claypool Publishers, 2008. (Synthesis lectures on quantum computing #1). ISBN 9781598296563,9781598296570,1598296574. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=246F15AEF9543FE03AEA10FAAC19D844>>.
- [84] WONG, T. G. *Introduction to classical and quantum computing*. [s.n.], 2022. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=e26d05d7c90ce31fd3ea180f36ff8545>>.
- [85] GISIN, N. et al. Quantum cryptography. *Rev. Mod. Phys.*, v. 74, n. 1, p. 145–195, mar 2002. ISSN 0034-6861. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.145>>.
- [86] Jefferson Deyvis dos Santos Silva. *Transferência de estados quânticos em cadeias com correlações na desordem*. 1–83 p. Tese (Dissertação de mestrado) — Universidade Federal De Alagoas, 2022.

- [87] MENDES, C. V. *Caminhada e transferência de estados quânticos em meios desordenados*. 1–129 p. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal de Alagoas, 2021.
- [88] WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, n. 10, p. 2245–2248, 1998. ISSN 10797114.
- [89] ALMEIDA, G. M. et al. Disorder-Assisted distribution of entanglement in XY spin chains. *Phys. Rev. A*, v. 96, n. 3, p. 1–10, 2017. ISSN 24699934.
- [90] SALES, M. O.; De Moura, F. A. Electron-soliton dynamics in chains with cubic nonlinearity. *J. Phys. Condens. Matter*, Institute of Physics Publishing, v. 26, n. 41, oct 2014. ISSN 1361648X.
- [91] DOMÍNGUEZ-ADAME, F. et al. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, n. 19, p. 1–4, 2003. ISSN 10797114.
- [92] MOURA, F. A. D. et al. Coherent electron dynamics in a two-dimensional random system with mobility edges. *J. Phys. Condens. Matter*, v. 19, n. 5, p. 1–7, 2007. ISSN 09538984.

APÊNDICE A

PROTOCOLO DE TRANSFERÊNCIA DE ESTADO QUÂNTICO EM CANAIS DE CADEIAS DE SPIN

A.1 Traço Parcial

O traço parcial é uma versão generalizada do traço [82]. Para exemplificar o traço parcial, vamos considerar um estado $|\psi\rangle_{AB} \in H_A \otimes H_B$ e suas bases $\{|a_i\rangle\}$ e $\{|b_j\rangle\}$, respectivamente. Ainda que os estados encontram-se emaranhados, o estado do primeiro qubit pode, geralmente, ser descrito pelo operador densidade reduzida ρ^A em H_A . O operador ρ^A pode ser obtido em termos do operador de densidade composto, através da operação de traço parcial sobre H_B [78, 86, 81]:

$$\begin{aligned}
 \rho^A &= \text{tr}_B(\rho^{AB}) \\
 &= \sum_l \langle m_l | \rho^{AB} | m_l \rangle = \sum_l \sum_{i,j} p_{i,j} \langle m_l | a_i b_j \rangle \langle a_i b_j | m_l \rangle \\
 &= \sum_l \sum_{i,j} p_{i,j} \delta_{j,l} |a_i\rangle\langle a_i| \delta_{j,l} \sum_i \left(\sum_l p_{i,l} \right) |a_i\rangle\langle a_i| \\
 &= \sum_i z_i |a_i\rangle\langle a_i| \quad , \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

onde $z_i = \sum_l p_{i,l}$.

A.2 Fidelidade

Seguindo a Referência [87] detalhamos algumas etapas do cálculo da fidelidade. A *fidelidade* de comunicação quântica:

$$F(t_0) = \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{\text{in}} | \rho_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle d\Omega \quad . \tag{A.2}$$

Explicitando o integrando,

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\text{in}} | \rho_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle &= P(t_0) \langle \psi_{\text{in}} | \psi_{\text{out}}(t_0) \rangle \langle \psi_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle + \langle \psi_{\text{in}} | [1 - P(t_0)] | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{\text{in}} \rangle \\
 &= \underbrace{P(t_0) \langle \psi_{\text{in}} | \psi_{\text{out}}(t_0) \rangle \langle \psi_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle}_{\text{(I)}} + \underbrace{\langle \psi_{\text{in}} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{\text{in}} \rangle}_{\text{(II)}} \\
 &\quad - \underbrace{P(t_0) \langle \psi_{\text{in}} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{\text{in}} \rangle}_{\text{(III)}} \quad . \tag{A.3}
 \end{aligned}$$

Para facilitar, vamos separar a equação (A.3) em três partes, isto é, (I), (II) e (III). Explici-

tando $\langle \psi_{\text{in}} | \psi_{\text{out}}(t_0) \rangle$ e $\langle \psi_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle$, obtemos

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\text{in}} | \psi_{\text{out}}(t_0) \rangle &= \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle 0 | + e^{-i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle 1 | \right] \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \\
 &\times \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{-i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) |1\rangle \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) \right]
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

e da mesma forma, teremos

$$\langle \psi_{\text{out}}(t_0) | \psi_{\text{in}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) (f_{r,s}^N(t_0))^* \right] . \tag{A.5}$$

Agora, desenvolvendo $\langle \psi_{\text{in}} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{\text{in}} \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\text{in}} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{\text{in}} \rangle &= \\
 &= \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle 0 | + e^{-i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle 1 | \right] |0\rangle \langle 0| \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{-i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \right] \\
 &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) .
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Substituindo (A.4) e (A.5) em (I) e (A.6) em (II) e (III) obtemos

$$\begin{aligned}
 \text{(I)} &= P(t_0) \left\{ \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) \right] \right\} \\
 &\quad \left\{ \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) (f_{r,s}^N(t_0))^* \right] \right\} \\
 &= \cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) (f_{r,s}^N(t_0))^* + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) \\
 &+ \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t_0)|^2 ,
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

$$(II) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (A.8)$$

Lembrando que $P(t_0) = \cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2)|f_{s,r}^N(t)|^2$, teremos

$$\begin{aligned} (III) &= P(t_0) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{s,r}^N(t)|^2 \right] \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &= \cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t_0)|^2 \quad . \end{aligned} \quad (A.9)$$

Em seguida, usamos (A.3), (A.7), (A.8) e (A.9) em (A.2), para integrar e obter a fidelidade:

$$\begin{aligned} F(t_0) &= \frac{1}{4\pi} \int \left[\cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) (f_{r,s}^N(t_0))^* + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) \right. \\ &\quad \left. + \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t_0)|^2 \right] d\Omega \quad . \end{aligned} \quad (A.10)$$

Como o integrando depende apenas de θ , temos

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin\theta d\theta d\phi = 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \quad . \quad (A.11)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} F(t_0) &= \frac{1}{2\pi} \int \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) (f_{r,s}^N(t_0))^* + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) \right. \\ &\quad \left. + \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t_0)|^2 \right] \sin\theta d\theta \\ &= \frac{1}{6} (f_{r,s}^N(t_0))^* + \frac{1}{6} (f_{r,s}^N(t_0)) + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \frac{1}{2} = \frac{1}{6} \underbrace{[(f_{r,s}^N(t_0))^* + (f_{r,s}^N(t_0))]}_{\Delta} + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \frac{1}{2} \quad . \end{aligned} \quad (A.12)$$

Reescrevendo Δ sabendo que $f_{r,s}^N(t_0) = |f_{r,s}^N(t_0)| e^{i \cdot \arg[f_{r,s}^N(t_0)]}$, da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \Delta &= |f_{r,s}^N(t_0)| \underbrace{[e^{i \cdot \arg[f_{r,s}^N(t_0)]} + e^{-i \cdot \arg[f_{r,s}^N(t_0)]}]}_{2 \cos[\arg(f_{r,s}^N(t_0))]} \\ &= 2|f_{r,s}^N(t_0)| \cos[\arg(f_{r,s}^N(t_0))] \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Logo,

$$F(t_0) = \frac{1}{3}|f_{r,s}^N(t_0)| \cos \gamma + \frac{1}{6}|f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \frac{1}{2} \quad , \quad (\text{A.14})$$

onde fizemos $\gamma = \arg[f_{r,s}^N(t_0)]$. Para maximizar a média da fidelidade acima, escolhemos um campo magnético externo B_i de modo que γ seja múltiplo de 2π [1, 2]. Dessa forma, obtemos

$$F(t_0) = \frac{1}{3}|f_{r,s}^N(t_0)| + \frac{1}{6}|f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \frac{1}{2} \quad . \quad (\text{A.15})$$

APÊNDICE B

ARTIGOS PUBLICADOS

B.1 Electronic Dynamics in 2D Aperiodic Systems under Effect of Electric Field

Electronic Dynamics in 2D Aperiodic Systems under Effect of Electric Field

Renato F. Dutra, Demitry Messias, Caio V.C. Mendes, Adhemar Ranciaro Neto, Messias O. Sales, and Francisco A. B. F. de Moura*

On a square lattice with aperiodic hopping terms, the dynamics of an initially localized one electron wave-packet is investigated using a Taylor formalism to solve Schrödinger dynamic equation. The calculations suggest that a fast electron propagation (ballistic mode) is detected for a range of values of aperiodicity measure ν . When inserting static electric field effects in the model, the existence of an oscillatory behavior analogously to electronic dynamics in crystalline systems is verified (i.e., Bloch oscillations). The frequency and the size of these oscillations are analyzed and the results are compared with the standard semi-classical approach used in crystalline lattices.

1. Introduction

Electronic propagation in quasi-crystals or aperiodic systems is a current theme with several theoretical and experimental investigation.^[1–22] Das Sarma was the first to demonstrate that slowly varying deterministic potentials promote the emergence of extended states.^[13,14] He and his coworkers initially considered an 1D model in which the potential energy at the site n is proportional to $\cos(\pi an^\nu)$. In the most famous variant of that author's model, πa is a rational number and $\nu > 0$. This parameter (ν) characterizes either randomness or periodicity of on-site potentials. For $0 < \nu < 1$, the diagonal potential is aperiodic; for $\nu > 1$, the on-site terms exhibits a pseudo-random framework. Upon a wide collection of distinct methods, it was proved that

whenever the diagonal potential is bounded in a finite region $[-V, V]$ with $V < 2$, the aperiodic model contains extended states given the limit of $0 < \nu < 1$.^[13,14]

The results found by Das Sarma et. al., i.e., the existence of mobility edges in 1D noncrystalline chains, stimulated other researchers to understand the role played by aperiodicity in different domains of science. In the recent years, several works involving aperiodic systems have been presented. In ref. [15], the problem of many-body localization (MBL) was experimentally investigated using ultra-cold atoms in a

weak 1D quasi-periodic potential. By studying the time evolution of an initial charge density wave, a clear signature of MBL was found when the corresponding noninteracting model is tuned within the localized phase. Other system such as a bichromatic quasi-periodic optical lattice was experimentally investigated in ref. [16]. The authors found experimental evidence for the existence of a single-particle mobility edge within this system. In ref. [17], 1D mutually incommensurate bichromatic lattice system was also analyzed. This kind of system can be experimentally implemented using ultra-cold atoms framework. The authors carried out an extensive investigation of the localization properties of the 1D incommensurate lattice without making any tight-binding approximation. They obtained the existence of a localization–delocalization transition with mobility edges separating localized from extended states. It is worth mentioning that the kind of aperiodicity introduced by Das Sarma and co-workers made the treatment of the limit of strong aperiodicity ($\nu > 1$, also called pseudo-random limit) and also of the quasi-periodic case ($\nu < 1$) possible. The case $\nu = 1$ represent the Aubry–André's limit. Therefore, the aperiodic source used by Das Sarma represents a useful numerical scheme that helps on investigation of a wide range of aperiodicities. In ref. [18], the interplay between non-Hermiticity from nonreciprocal hopping and the aperiodicity was investigated. It was studied the topological transition of non-Hermitian skin effect in nonreciprocal Aubry–André models and it was obtained the exact phase diagram. The authors also proposed an electrical circuit that was used to demonstrate the transition properties. In ref. [19], the authors investigated a standard aperiodic Aubry–André model with power-law hopping (r^{-a}). For $a > 1$, the model is characterized by a hierarchy of regimes with mobility edges. For $a \leq 1$, all states remain delocalized.


More recently, the Aubry–André model and its generalizations as well as the Soukoulis–Economou model were extensively investigated in ref. [21]. The authors demonstrated that the

R. F. Dutra, D. Messias, C. V. C. Mendes, Dr. F. A. B. F. de Moura
Instituto de Física
Universidade Federal de Alagoas
Maceió, AL 57072-970, Brazil
E-mail: fidelis@fis.ufal.br

Dr. A. R. Neto
Faculdade de Economia
Administração e Contabilidade
Universidade Federal de Alagoas
57072-970 Maceió, AL, Brazil

Dr. A. R. Neto
Ministry of Economy – Special Secretariat for Finance
Esplanada dos Ministérios BL P, Brasilia, DF 70297-400, Brazil

Dr. M. O. Sales
Instituto Federal do Maranhão (IFMA)
Campus São João dos Patos
rua Padre Santiago, s/n, Centro, São João dos Patos, MA 65665-000, Brazil

 The ORCID identification number(s) for the author(s) of this article can be found under <https://doi.org/10.1002/pssb.201900782>.

DOI: 10.1002/pssb.201900782

aperiodicity plays relevant role within the context of mobility edges and also the single-particle intermediate phase. In broad strokes, the localization aspects within aperiodic systems has been investigated both theoretically and experimentally. The main results suggest that the aperiodicity promotes the appearance of extended states hence increasing the conductance.^[23]

In this work, we report further progress on the subject of electronic propagation in systems with aperiodicity. We consider the electron dynamics on a square lattice in which the hopping terms follow an aperiodic distribution, and the presence of a static electric field parallel to the lattice. The source of aperiodicity here is similar to that used by Das Sarma: we assume a sinusoidal function whose phases are proportional to a power-law. The power-law exponent controls the degree of aperiodicity in the lattice. In this system, wave-packet time evolution is described by the Schrödinger equation; we solved that using a Taylor formalism. Our calculations suggest that the system may exhibit a fast electron propagation (ballistic propagation) depending on the degree of aperiodicity. When a static electric field is inserted, our calculations reveal the existence of an oscillatory behavior similar to that happen in crystalline systems (i.e., Bloch oscillations). We also investigated the frequency as well as the size of these oscillations, and compared our results with the standard semi-classical approach used in crystalline lattices.

2. Model and Formalism

We consider initially the Hamiltonian of an electronic model with aperiodic hopping energies $t_{nm,jk}$ on a rectangular $N \times N$ lattice^[8,24]

$$H = \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| + \sum_{(im,jk)} (t_{nm,jk} |n, m\rangle \langle j, k|) \quad (1)$$

where $|n, m\rangle$ is a Wannier state localized at site (n, m) and $\sum_{(nm,jk)}$ represents a sum over nearest-neighbor pairs. In our calculations, the on-site energy $\epsilon_{n,m}$ is related to the presence of a static electric field $E = E_x x + E_y y$. The potential energy of the electron interacting with this electric field is given by: $\epsilon_{n,m} = E_x(n - N/2) + E_y(m - N/2)$ (the electron charge e and the lattice spacing a were considered $e = a = 1$ ^[8]). To generate an aperiodic hopping energy topography, we compute the following 2D aperiodic function defined as^[8,13-17]

$$\zeta_{n,m} = W \cos(\pi \alpha n^\nu) \cos(\pi \alpha m^\nu) \quad (2)$$

where W is a constant and $\pi \alpha$ is a rational number. Here, within the 2D geometry, $W < 4$.^[8] The exponent ν controls the degree of aperiodicity within this 2D landscape. The hopping energy $t_{nm,jk}$ is given by $t_{nm,jk} = \exp(-|\zeta_{n,m} - \zeta_{j,k}|)$. We stress that this exponential transformation generates a bounded interval of the aperiodic variable without changing its intrinsic incommensurate properties—it is a numerical trick deployed to assure aperiodicity in the off-diagonal term's distribution without any null hopping terms. We emphasize that the choice of this kind

of aperiodicity has a great advantage in comparison with other aperiodic distribution. The degree of aperiodicity within this 2D sinusoidal function can be tuned by a single parameter ν . For $\nu > 1$, we are dealing with the pseud-random limit. For $\nu < 1$, we have a quasi-periodic limit. Therefore, this procedure allows for generation of various kinds of aperiodic potentials. The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent Schrödinger equation as $(\hbar = 1)$ ^[8,24]

$$i \frac{dc_{n,m}(t)}{dt} = [E_x(n - N/2) + E_y(m - N/2)]c_{n,m} + t_{nm,nm-1}c_{n,m-1}(t) + t_{nm,nm+1}c_{n,m+1}(t) + t_{nm,n-1m}c_{n-1,m}(t) + t_{nm,n+1m}c_{n+1,m}(t) \quad (3)$$

$$i, m = 1, 2, \dots, N$$

In the absence of electric field ($E_x = E_y = 0$), we considered the electron initially localized at site $n_0 = N/2, m_0 = N/2$, i.e., $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m}(t=0)|n, m\rangle$, where $c_{n,m}(t=0) = \delta_{n,n_0} \delta_{m,m_0}$. For $E_x = E_y = E > 0$, we defined the initial state as a Gaussian packet with $c_{n,m}(t=0) = (1/A) \exp(-D(n, m)^2/4)$, where $D(n, m) = \sqrt{(n - n_0)^2 + (m - m_0)^2}$ and A is a normalization constant. The aforementioned set of equations were solved numerically by using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator $V(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{z_0} [(-iH\Delta t)^l]/l!$, where H is the Hamiltonian. The wave-function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = V(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. The method can be used recursively to obtain the wave-function at time t . To get $H^l|\Phi(t=0)\rangle$, we used a recursive formula derived as follows. Let $H^l|\Phi(t=0)\rangle = \sum_{nm} C_{n,m}^l |n, m\rangle$. Using the Hamiltonian formula (Equation (1)), we compute $H^l|\Phi(t=0)\rangle$ and obtain $C_{n,m}^1$ as

$$C_{n,m}^1 = [E_x(n - N/2) + E_y(m - N/2)]c_{n,m}(t=0) + t_{nm,nm-1}c_{n,m-1}(t=0) + t_{nm,nm+1}c_{n,m+1}(t=0) + t_{nm,n-1m}c_{n-1,m}(t=0) + t_{nm,n+1m}c_{n+1,m}(t=0) \quad (4)$$

Therefore, using that $H^l|\Phi(t=0)\rangle = H \sum_{nm} C_{n,m}^{l-1} |n, m\rangle$, $C_{n,m}^l$ can be obtained recursively as

$$C_{n,m}^l = [E_x(n - N/2) + E_y(m - N/2)]C_{n,m}^{l-1} + t_{nm,nm-1}C_{n,m-1}^{l-1} + t_{nm,nm+1}C_{n,m+1}^{l-1} + t_{nm,n-1m}C_{n-1,m}^{l-1} + t_{nm,n+1m}C_{n+1,m}^{l-1} \quad (5)$$

The results without electric field can be taken adopting $\Delta t = 0.08$ and the sum was truncated at $z_0 = 10$. This cutoff was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered. In the case considering electric field, we have used $\Delta t = 0.01$ and $z_0 = 12$. This formalism is faster than high-order Runge Kutta methods and it is easier to implement. We are particularly interested in calculating the electronic mean position defined as

$$R(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (x + y) \cdot (\langle n \rangle(t)x + \langle m \rangle(t)y) \quad (6)$$

where $\langle n \rangle(t) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N n |c_{n,m}(t)|^2$ and $\langle m \rangle(t) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N m |c_{n,m}(t)|^2$. We also computed wave packet mean-square displacement $\sigma(t)$ defined by^[24]

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N [(n - n_0)^2 + (m - m_0)^2] |c_{n,m}(t)|^2} \quad (7)$$

Note that $\sigma(t)$ varies from 0, for a wave function confined to a single site, to N , for a wave uniformly extended over the whole chain.^[8,24,26]

3. Results

Our first analysis is carried in the case of a $N \times N$ lattice with $N = 3000$, $W = 3$ and without electric field, i.e., $E_x = E_y = 0$. Because of the system size, we did not solve the set of equations for all sites, only for a finite fraction of the lattice around the center of chain ($n_0 = N/2$ and $m_0 = N/2$). This subdivision started with size $N_0 \times N_0$ (with $N_0 = 100$) centered around the site (n_0, m_0) . Whenever the wave-packet arrived at the borders of this small region, we expanded N_0 to avoid boundary effects. This artifice speeds up the calculations and also removes the possibility of border reflections. In **Figure 1a**, we plot our results for the mean square displacement σ versus t for $E_x = E_y = 0$, $\pi\alpha = 0.5$, and $\nu = 0.5, 0.75, 1.5, 2$. The results showed in **Figure 1a** indicated that, for $\nu < 1$, the wave-function spread increased roughly linearly with time (i.e., $\sigma(t) \propto t^1$). It is a clear signature that exists extended states at this limit. In contrast, computation for $\nu > 1$ showed that the time evolution of wave-function's width exhibited a slower dynamic pointing at the absence of extended states at this limit. To analyze the localization–delocalization transition within this model, we watch the long-time behavior of σ as the ν exponent is tuned. In broad strokes, for long times, the mean square displacement behaves as $\sigma \propto t^\beta$, where the exponent β depends on ν . To obtain the dependence of β with ν , we run several numerical simulations considering ν within the range $[0.1, 1.5]$. We also considered several values for the parameter $\pi\alpha$ ($\pi\alpha = 0.2$ up to 2.0). **Figure 1b** contains the average curve $\beta \times \nu$ obtained using all calculations. The exponent β was

computed through a power-law fitting at the long-time limit. The results showed in **Figure 1b** indeed confirm that for $\nu < 1$ the dynamics is ballistic (i.e., the systems contains extended states). However, within our accuracy, the critical points separating extended from localized states is slightly smaller than $\nu = 1$. Based on **Figure 1b**, we notice that only for $\nu < 0.8$ the dynamics seems to be really ballistic. For $\nu = 0.8$, the long-time behavior of σ was characterized by an exponent $\beta = 0.97(2)$. For $\nu = 0.9$, we obtained $\beta = 0.94(2)$ and for $\nu = 1$, $\beta = 0.84(2)$. Therefore, for $0.8 \leq \nu \leq 1$, the dynamics seems to be super-diffusive with exponents between $[0.84, 0.97]$. We stress that within the 1D case studied by Das Sarma and co-workers, the critical point separating extended from localized states was $\nu = 1$. Within the framework of 2D models with nonperiodic hopping terms this general trend seems to be also roughly found; however, the critical point is slightly smaller than $\nu = 1$. In general, for $\nu < 1$, we found a fast electronic dynamics; however, only for $\nu < 0.8$, we indeed found a really ballistic propagation.

We will consider now the effect of a static electric field parallel to the aperiodic lattice (i.e., $E = E_x x + E_y y$) with $E_x = E_y = E$. We emphasize that at the presence of electric field, the wave-packet remains trapped around the initial position. Therefore, it is not necessary to consider big systems. Within the cases with electric field, we considered a $N \times N$ lattice with $N = 300$, $\pi\alpha = 0.5$, and $W = 3$. The Taylor formalism was considered with $\Delta t = 0.01$ and $z_0 = 12$. All calculations with nonzero electric field were carried for times up to $t_{max} = 2000$. For the improvement of system dynamics visualization, we plot the data for short times ($t \approx 100$). In **Figure 2** and **3**, we plot a summary of our main calculations considering $E = 0.5$ (**Figure 2**) and $E = 0.7$ (**Figure 3**). In **Figure 2** and **3a,b**, we plot the electronic mean position versus time for $E = 0.5$ and 0.7 considering $\nu = 0.5$ and 1.5 . For $\nu = 0.5$, we could see that for both values of E , the electronic wave-packet exhibit a coherent oscillatory motion with a single frequency. For $\nu = 1.5$, we observed a complete absence of a coherent dynamics. The oscillatory dynamics found in **Figure 2** and **3** for $\nu = 0.5$ is similar to the “Bloch oscillations”,^[8,27] originally defined within the framework of crystalline lattices. Using a semi-classical formalism,^[8,27] it was easy to prove that, in a crystalline system (i.e., disorder free), an uniform

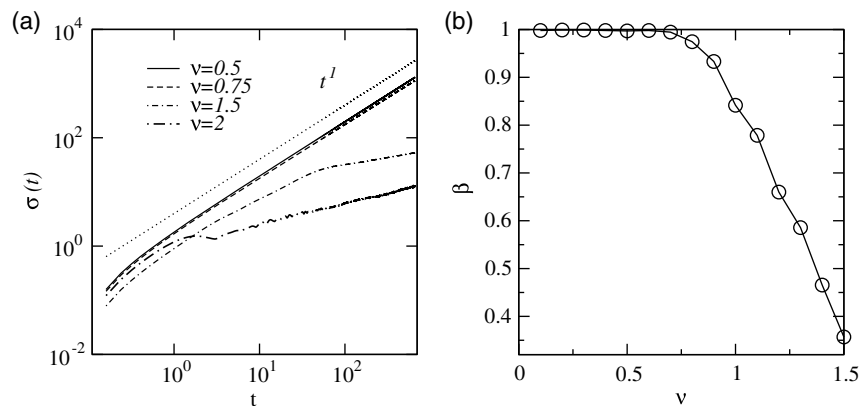


Figure 1. a) Mean square displacement σ versus t for $E_x = E_y = 0$ and $\nu = 0.5, 0.75, 1.5, 2$. Our results indicate that for $\nu < 1$ the wave-function exhibits roughly a ballistic spread (i.e., $\sigma(t) \propto t^\beta$ with $\beta \approx 1$). b) The exponent β versus ν considering ν within the range $[0.1, 1.5]$. Calculations of β were averaged using $\pi\alpha = 0.2$ up to 2.0 .

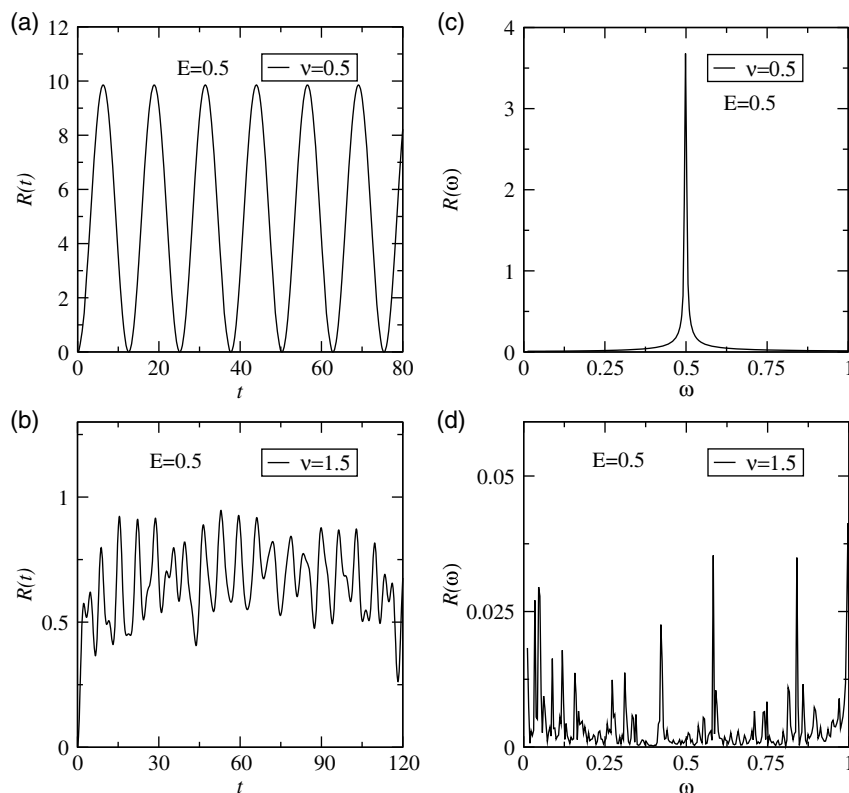


Figure 2. a,b) Electronic mean position $R(t)$ versus time for electric field $E_x = E_y = E = 0.5$ and considering $\nu = 0.5$ and 1.5 . c,d) The Fourier transform $R(\omega)$ versus ω for the cases shown in (a,b).

electric field E causes dynamic localization of the wave-packet. Moreover, the interaction with the electric field also gives rise to an oscillatory motion called Bloch oscillations.^[8] The semi-classical procedure also provides the frequency (ω_E) of the electronic oscillations as well as the size (L_E) of the segment over which the electron keep its dynamics: $\omega_E = E$ and $L_E \propto 1/E$ (we are considering units in which that $e = \hbar = a = 1$). We calculated the oscillation frequency using fast Fourier transform of the function $R(t)$. Our results of $R(\omega)$ versus ω for $E = 0.5, 0.7$ and $\nu = 0.5$ and 1.5 are found in Figure 2 and 3c,d. We noted that, for $\nu = 0.5$, the Fourier transform revealed a well-defined single peak around $\omega = E$ (congruent with the semi-classical predictions). For $\nu = 1.5$, we found a wide Fourier spectrum, thus indicating the total absence of a coherent Bloch oscillation. Therefore, for $0 < \nu < 1$, our results indeed suggested that the electric field promotes the appearance of “Bloch-like oscillations” with frequency in excellent agreement with the semi-classical predictions.

We analyzed other aspects related to the oscillatory behavior found in Figure 2 and 3 and its comparisons with the semi-classical predictions. In **Figure 4a**, we plot $R(t)$ versus t for $\nu = 0.5$, $\pi\alpha = 0.5$, and $E = 0.2, 0.4, 0.6$ and 0.8 . We observed clearly that the amplitude of the oscillatory behavior decreases as the electric field intensity is increased. This results seemed to be in consonance with the semi-classical results. To make a direct comparisons, we estimated the size L_E for several values of electric field E (see Figure 4b). To estimate L_E , we considered that $\langle n \rangle(t)$ and $\langle m \rangle(t)$ are roughly identical and, therefore, the size

L_E can be obtained as $L_E \approx (\sqrt{2}/2)R_{\max}$, where R_{\max} is the maximum value of $R(t)$. The plot of L_E versus $1/E$ is found in Figure 4b. We could see indeed $L_E \propto 1/E$ (again, in good agreement with the semi-classical predictions). We stress that, by applying a semi-classical approach to standard Bloch system, the size L_E should be given by $L_E = B/E$, where B is the width of the Bloch band. However, our model is not a Bloch system and the “Bloch band” is not well defined here. In ref. [27], they considered a generalized approximate relation $L_E = B^*/E$, where B^* was the width of the band of extended states. Therefore, roughly, the linear fitting of the data showed in Figure 4b, provided the width of the band of extended states that exists within our model. Using a linear fitting $L_E = B^*(1/E) + a$, we obtain $B^* \approx 3$. However, we stress that it is not a precise estimation of the width of extended state’s band because both the numerical estimation of L_E and equation $L_E \approx B^*/E$ contains approximations. However, despite the approximations related to the size of band, our calculations indeed suggested the existence of a band of extended states in 2D systems with weak aperiodicity ($\nu < 0.8$).

4. Conclusion

In summary, we analyzed the electronic propagation in systems with aperiodicity under effect of a static electric field. Considering electron dynamics on a square lattice with hopping terms distributed aperiodically, we investigated the time evolution of an initially localized wave-packet by using a Taylor

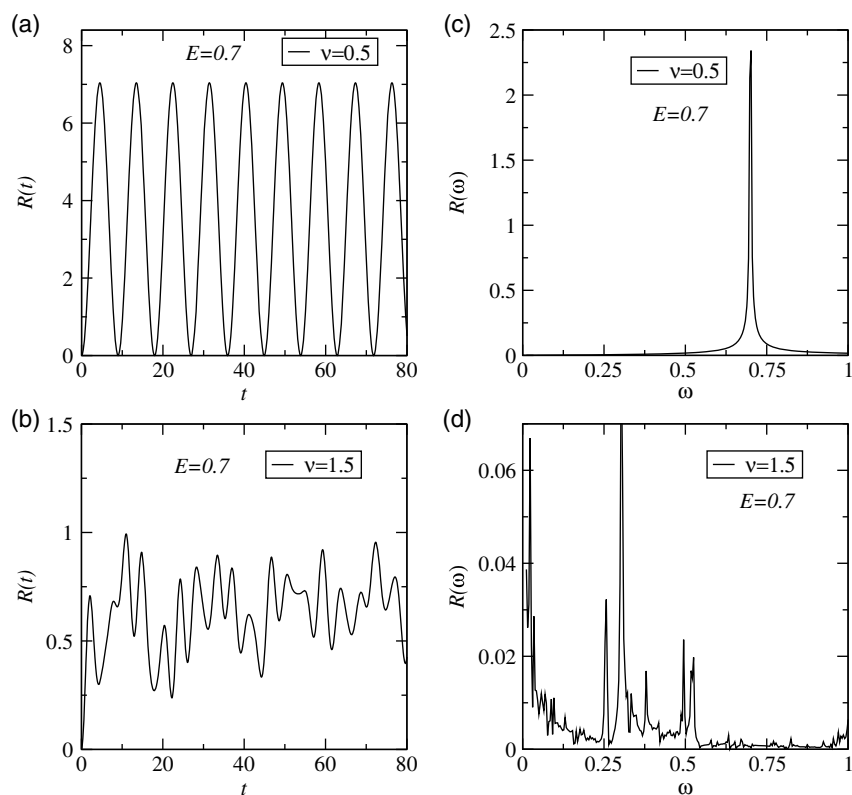


Figure 3. a,b) Electronic mean position $R(t)$ versus time for electric field $E_x = E_y = E = 0.7$ and considering $\nu = 0.5$ and 1.5 . c,d) The Fourier transform $R(\omega)$ versus ω for the cases shown in (a,b).

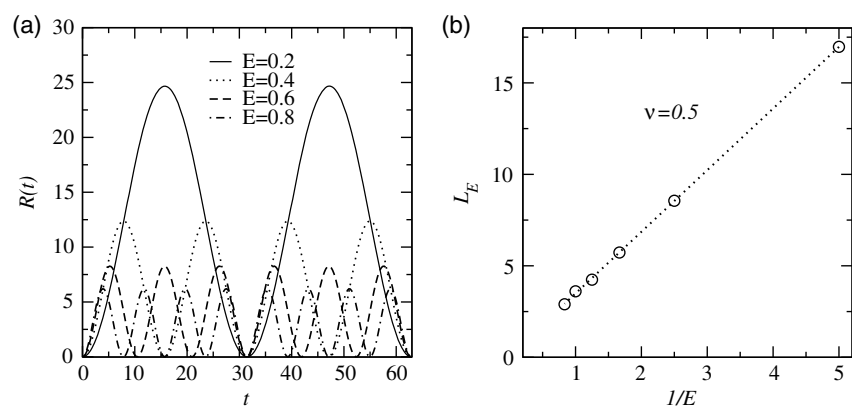


Figure 4. a) $R(t)$ versus t for $\nu = 0.5$ and $E = 0.2, 0.4, 0.6,$ and 0.8 . b) The size L_E versus $1/E$ considering $\nu = 0.5$.

formalism to solve the Schrödinger equation. Our results suggest that the system may exhibit a fast electron propagation (ballistic propagation) depending on the degree of aperiodicity. After introducing a static electric field to the system, our calculations revealed the existence of an oscillatory behavior which is similar to the Bloch oscillations. Also, we calculated the oscillation's frequency and the size of region in which the wave-packet remains trapped. Our results are in good agreement with the standard semi-classical approach.

Acknowledgements

The research was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES, INCT-Nano(Bio)Simes, as well as FAPAL (Alagoas State Agency).

Conflict of Interest

The authors declare no conflict of interest.

Keywords

correlated disorder, diffusive spreading, localization, wave-packet dynamics

Received: December 25, 2019

Revised: March 18, 2020

Published online:

-
- [1] E. Maciá, *Aperiodic Structures in Condensed Matter: Fundamentals and Applications*, CRC Press, Boca Raton, FL **2008**.
- [2] E. Maciá, F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *76*, 2957.
- [3] E. Maciá, *Rep. Prog. Phys.* **2012**, *75*.
- [4] S. Walter, D. Schneble, A. C. Durst, *Phys. Rev. A* **2010**, *81*, 033623.
- [5] F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, *Phys. Rev. B* **2005**, *71*, 104303.
- [6] F. A. B. F. de Moura, L. P. Viana, A. C. Frery, *Phys. Rev. B* **2006**, *73*, 212302.
- [7] A. A. Sukhorukov, *Phys. Rev. Lett.* **2006**, *96*, 113902.
- [8] F. A. B. F. de Moura, L. P. Viana, M. L. Lyra, V. A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, *Phys. Lett. A* **2008**, *372* 6694.
- [9] T. Cadez, R. Mondaini, P. D. Sacramento, *Phys. Rev. B* **2017**, *96*, 144301.
- [10] C. M. Dai, W. Wang, X. X. Yi, *Phys. Rev. A* **2018**, *98*, 013635.
- [11] X. C. Xie, S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **1988**, *60*, 1585.
- [12] S. Das Sarma, X. C. Xie, *Phys. Rev. B* **1988**, *37*, 1097.
- [13] S. Das Sarma, S. He, X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **1988**, *61*, 2144.
- [14] S. Das Sarma, Song He, X. C. Xie *Phys. Rev. B* **1990**, *41*, 5544.
- [15] T. Kohler, S. Scherg, X. Li, H. P. Lüschen, S. Das Sarma, I. Bloch, M. Aidelsburger, *Phys. Rev. Lett.* **2019**, *122*, 170403.
- [16] H. P. Lüschen, S. Scherg, T. Kohler, M. Schreiber, P. Bordia, X. Li, S. Das Sarma, I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **2018**, *120*, 160404.
- [17] X. Li, X. Li, S. D. Sarma, *Phys. Rev. B* **2017**, *96*, 085119.
- [18] H. Jiang, L.-J. Lang, C. Yang, S.-L. Zhu, S. Chen, *Phys. Rev. B* **2019**, *100*, 054301.
- [19] X. Deng, S. Ray, S. Sinha, G. V. Shlyapnikov, L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **2019**, *123*, 025301.
- [20] P. Wang, Y. Zheng, X. Chen, C. Huang, Y. V. Kartashov, L. Torner, V. V. Konotop, F. Ye, *Nature* **2020**, *577* 42.
- [21] X. Li, S. D. Sarma, *Phys. Rev. B* **2020**, *101*, 064203.
- [22] A. Szabó, U. Schneider, *Phys. Rev. B* **2020**, *101*, 014205.
- [23] F. Flicker, J. van Wezel, *Phys. Rev. Lett.* **2015**, *115*, 236401.
- [24] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, M. L. Lyra, *Europhys. Lett.* **2004**, *66*, 585.
- [25] I. F. dos Santos, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, M. D. Coutinho-Filho, *J. Phys.: Condens. Matter* **2007**, *19*, 476213
- [26] F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, *J. Phys.: Condens. Matter* **2007**, *19*, 056204.
- [27] F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91* 197402.

