A Equação de Schrödinger Não Linear com Desordem Aperiódica

Isabel Friedmann Flöther

Orientador: Gerardo Guido Martínez Pino

IF - UFRGS

Introdução

Neste trabalho, buscamos estudar as propriedades globais de sistemas de bósons autointeragentes na presença de desordem. Para tanto, calculamos a evolução temporal de seguinte equação de Schrödinger não-linear para diferentes configurações iniciais:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = -\omega(\psi_{i-1}+\psi_{i+1}) + \epsilon_i\psi_i + F_i\psi_i + U|\psi_i|^2\psi_i$$

Em que ω é o hopping, que foi definido como sendo 1, U é a intensidade da autointeração ou não-linearidade, $F_i = F_0 i$ é um campo elétrico externo, e $\epsilon_i = \epsilon_0\, cos(2\pi\beta i)$ com $\beta = (1+\sqrt{5})/2$ é uma desordem aperiódica do tipo Aubry-André no potencial.

As propriedades globais escolhidas para a análise do sistema foram:

1. Desvio quadrático médio (MSD): $\sigma^2(t) = \sum_i i^2|\psi_i(t)|^2$
2. Entropia de Shannon: $S(t) = -\sum_i |\psi_i(t)|^2 \ln|\psi_i(t)|^2$
3. Inverso do número de participação: $1/P(t) = \sum_i |\psi_i(t)|^4$
4. Perfil do sítio central da rede: $|\psi(i=0,t)|^2$

Essas grandezas permitem testar a localização do sistema ao longo do tempo e verificar se a evolução de pacotes de onda inicialmente localizados na origem é difusiva ou balística.

Metodologia

A evolução temporal da equação descrita acima foi feita utilizando uma implementação em python do algoritmo de Thomas para a diagonalização de matrizes tridiagonais. Foram estudadas condições iniciais do tipo delta ($\psi_i(t=0) = \delta_{i,0}$) e do tipo gaussiana ($\psi_i(t=0) = exp(-i^2/\sigma^2)$), ambas centradas na origem (sítio 0). Os parâmetros U, F_0 e ϵ_0 foram variados para verificar seus efeitos sobre o pacote e sobre a localização deste.

O erro proveniente do algoritmo de integração foi mensurado comparando seus resultados com as soluções analíticas existentes para os casos mais simples da equação de Schrödinger. Para a condição inicial delta com $U = F_0 = \epsilon_0 = 0$, por exemplo, sabe-se que a evolução do pacote segue a expressão:

$$\psi_j(t) = J_{|j-j_0|}(-2\omega t/\hbar)\, exp(-ij\pi/2)$$

Em que j é o índice do sítio, $j_0 = 0$ e J_j é a função de Bessel de ordem j, encontrada na biblioteca SciPy para python. Verificamos que, para intervalos de tempo de integração da ordem de 10^{-4} unidades de tempo ou menores, o algoritmo acumula um erro desprezível (de ordem de 10^{-15}).

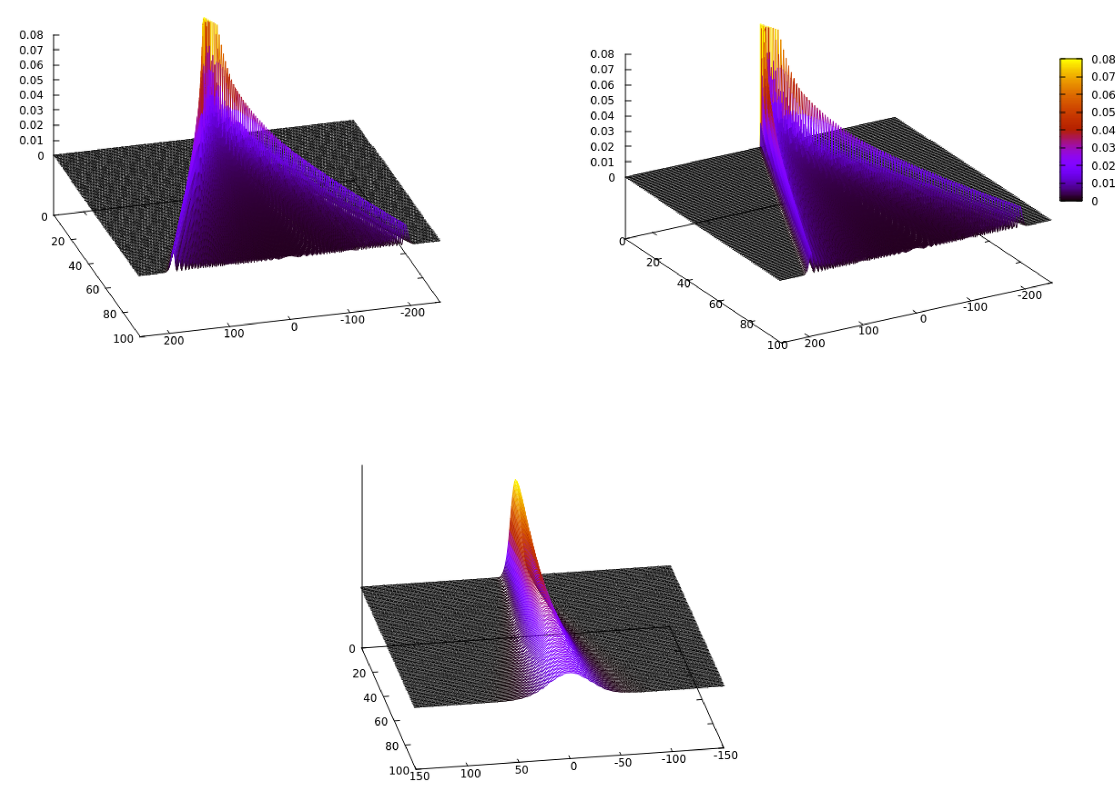

Figura 1: Gráficos de $|\psi_i(t)|^2$ da solução analítica para a delta livre (esquerda), da solução numérica correspondente (direita) e da evolução da gaussiana livre (embaixo). Aqui livre se refere à evolução sem autointeração, sem desordem e sem campo elétrico.

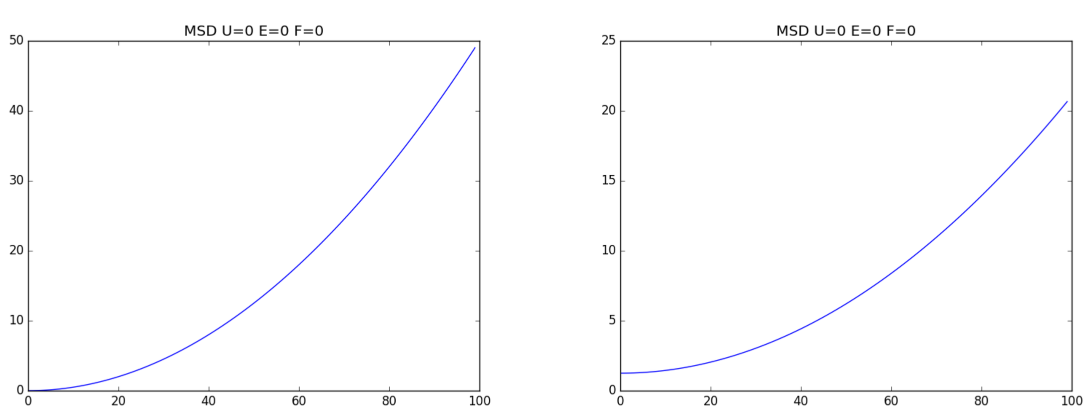

Figura 2: Desvio quadrático médio (MSD) da distribuição em função de tempo para condições iniciais do tipo delta (esquerda) e do tipo gaussiana (direita). Ambos apresentam um comportamento quadrático no tempo.

Resultados

Nas figuras abaixo, estão representados os efeitos da autointeração, do campo elétrico e da desordem sobre o sistema, quando cada um desses parâmetros é aplicado sem a presença dos outros, permitindo uma análise isolada de seu efeito. Na Figura 3, vemos que a autointeração pode causar localização de parte da função de onda quando ela é atrativa (sinal negativo). O desvio quadrático médio cresce mais devagar (o crescimento é causado pelos sólitons que surgem em torno do ponto central).

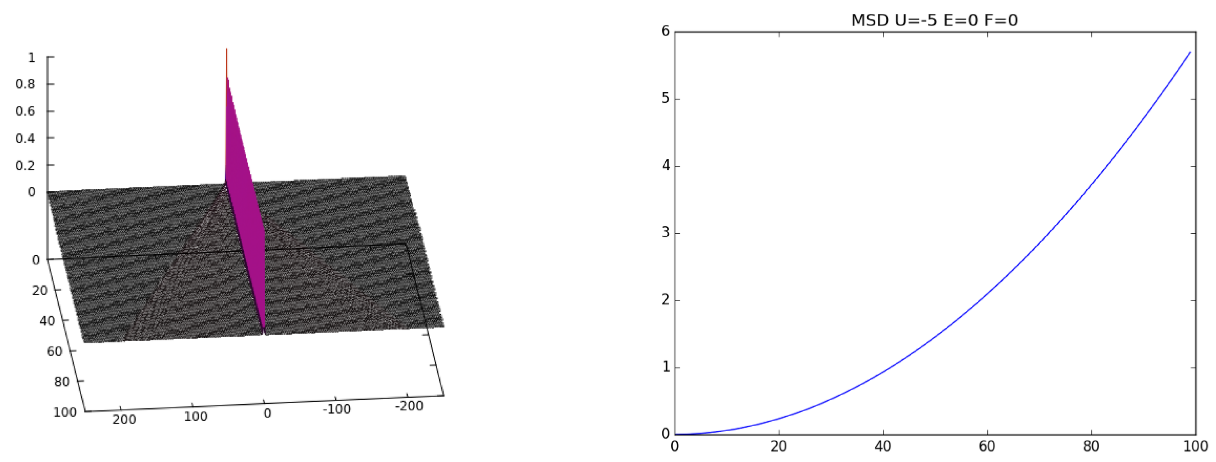

Figura 3: Evolução do pacote de ondas tipo delta com $U = -5$ e $F_0 = \epsilon_0 = 0$ (esquerda) com o desvio quadrático médio da distribuição ao longo de tempo (direita).

O campo elétrico, por outro lado, ver Figura 4, causa oscilações na largura da distribuição conhecidas como oscilações de Bloch (no caso da delta - para a gaussiana, o centro da distribuição oscila mas com a largura permanecendo constante). O período é conhecido e igual a $2\pi/F_0$ nas unidades utilizadas.

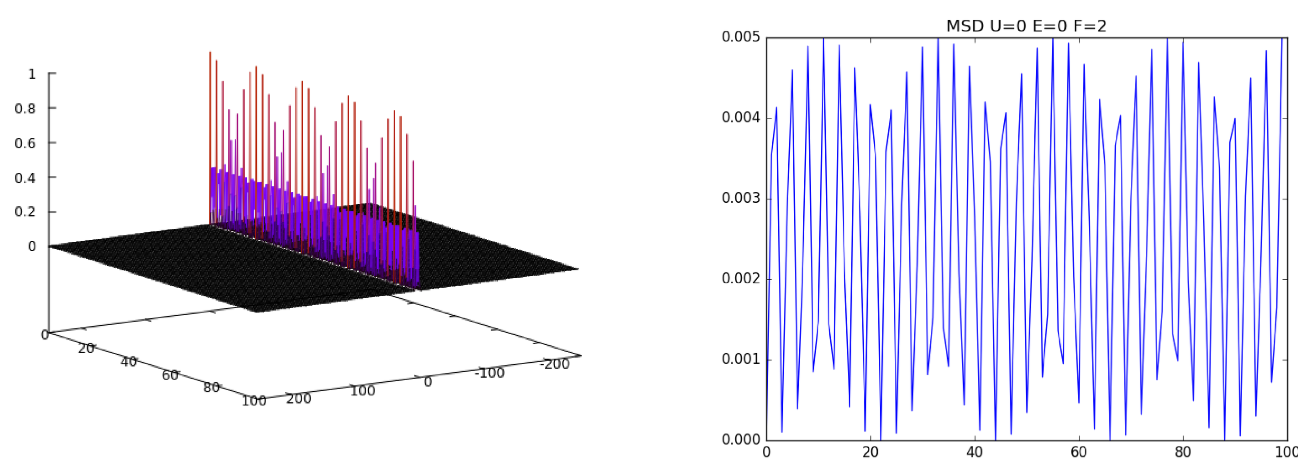

Figura 4: Evolução do pacote de ondas tipo delta com $F_0 = 2$ e $U = \epsilon_0 = 0$ (esquerda) com o desvio quadrático médio da distribuição ao longo de tempo (direita).

Por fim, a desordem também pode ter um efeito localizador sobre a função de onda, como observado na Figura 5. Este, no entanto, não segue um padrão visível e resulta em uma evolução irregular. Pode-se notar também que o desvio quadrático médio continua crescendo, mas com menor velocidade e também de forma irregular, de caráter "quase" linear.

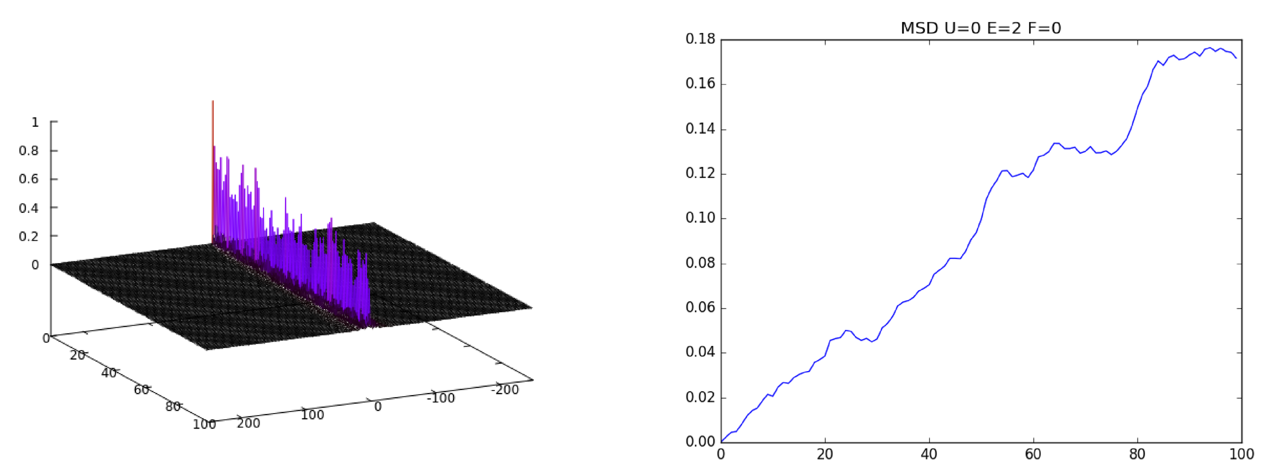

Figura 5: Evolução do pacote delta (esquerda) e do MSD (direita), com $\epsilon_0 = 2$ e $F_0 = U = 0$

Conclusão

Neste trabalho, estudamos a influência de três parâmetros (a autointeração, o campo e a desordem) sobre a localização de um pacote de onda. Verificamos que os resultados encontrados são compatíveis com os apresentados em [1]. O objetivo final é variar diversos parâmetros simultaneamente e assim obter uma descrição para os limites de localização em função de U, F_0 e ϵ_0.

Agradecimentos

Agradeço especialmente ao Marcos Pérez, estudante de doutorado em física da UFRGS, por sua grande ajuda na elaboração dos programas utilizados.

Referências

[1] JUNGES, Leandro. Tese de mestrado, IF-UFRGS, 2009. "A equação de Schrödinger não linear discreta com desordem de Aubry-André e com campo elético DC".