

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

ANDERSON RAFAEL CORREIA BUARQUE DA SILVA

**DINÂMICA DE PARTÍCULAS EM NANOESTRUTURAS
1D SOB INFLUÊNCIA DE CAMPOS ELÉTRICOS
PULSADOS**

Maceió

2018

ANDERSON RAFAEL CORREIA BUARQUE DA SILVA

**DINÂMICA DE PARTÍCULAS EM NANOESTRUTURAS
1D SOB INFLUÊNCIA DE CAMPOS ELÉTRICOS
PULSADOS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós Graduação em Física da Universidade Federal de Alagoas, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Orietador: Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias

Maceió

2018



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física
Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14, Campus A.C. Simões
Cidade Universitária
Tabuleiro dos Martins
57072-970 Maceió - AL, Brasil
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

***“Dinâmica de partículas em nanoestruturas 1D sob
influência de campos elétricos pulsados”***

por

Anderson Rafael Correia Buarque da Silva

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Paulo Eduardo de Brito, da Universidade de Brasília consideram o candidato **aprovado com grau “A”**.

Maceió, 27 de fevereiro de 2018


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central

Bibliotecário Responsável: Janis Christine Angelina Cavalcante – CRB: 1664

S586d Silva, Anderson Rafael Correia Buarque da.
Dinâmica de partículas em nanoestruturas 1D sob influência de campos elétricos pulsados / Anderson Rafael Correia Buarque da Silva. – Maceió, 2018.
103 f. : il. color.

Orientador: Wanderley da Silva Dias.
Dissertação (Mestrado em Física da matéria condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física, 2018.

Bibliografia: f. 73+79.
Apêndices: f. 80-90.
Anexos: f. 91-103.

1. Campo elétrico pulsado. 2. Elétrons interagentes. 3. Partículas Correlacionadas. 4. Cadeia não linear. I. Título.

CDU: 537.212

Agradecimentos

Minha família por todo o apoio de sempre. Em especial aos meus amores: Regina (mãe), Sérgio (pai), Gabriella e Marianna (irmãs), responsáveis pelo que sou hoje. Ao longo desses dois anos duas pessoas se tornaram mais que especiais: Juli (namorada) e Giselle (cunha) só tenho a agradecer por me ajudarem e aguentarem minha chatice, amo vocês.

Ao meu orientador, Prof. Wandearley Dias, pela paciente e indispensável orientação ao longo da minha carreira acadêmica (anos de Iniciação científica e dois anos de mestrado. Quem sabe mais quatro anos?!), por todo o conhecimento transmitido, pelos conselhos e por ser um exemplo de profissional a ser seguido. A todos os professores do Instituto de Física.

Aos amigos: do grupo "PT Symmetric in churras": Henrique, Paulo, Danilo, Zezo (melhor programador da UFAL) pelos momentos de fofoca, descontração, hora do suquinho e claro momentos de ciência. Aos amigos do grupo "Copa IF UFAL"(ei jegue!): Rafaela, Camyla, Giva (identidade dupla), Elias, Lalinha, Waléria, Artur, Henrique Lopes, Leandro Melo por todos os momentos compartilhados nesses dois anos. Ao amigos PV, Luan Martins e todos os outros que passaram em minha vida de IF-UFAL, pelos momentos de conversa e aprendizagem. E aos amigos, cuja amizade ultrapassa os muros de Universidade, Maxwell Monteiro, Arthur Souto e João Vitor Ramos.

A CAPES pela ajuda financeira.

Muito obrigado!

Resumo

A manipulação e controle de ondas de matéria estáveis e espacialmente localizadas através de campos externos é um objeto muito atraente do ponto de vista científico e tecnológico. Entender como se dá o comportamento de partículas sob ação de campos de condução nos permite aplicar diretamente em tecnologias atuais como efetuar armazenamento de estados quânticos e transferência coerente de informação quântica. O controle da dinâmica eletrônica pode nos fornecer acesso a tarefas computacionais de forma eficiente. Nessa dissertação de Mestrado investigamos o papel de alguns ingredientes sobre dinâmica do elétron em uma cadeia cristalina sob ação de um campo elétrico pulsado, tais como: a interação elétron-elétron de Hubbard e o acoplamento elétron-fônon. Trabalhamos com modelos numéricos de sistemas nanoestruturados destinados à solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. Apresentamos uma excelente concordância entre os resultados obtidos numericamente com a abordagem semi-clássica. No primeiro trabalho modelamos um elétron em uma cadeia cristalina 1d sob ação de um campo externo pulsado. Mostramos que ao aplicarmos uma sequência de pulsos elétricos temos o surgimento de um novo comportamento do pacote de ondas eletrônico. Se ligarmos o campo elétrico pulsado em apenas um instante de tempo, dando um momento inicial a partícula, o elétron realiza um movimento unidirecional. Apresentamos a possibilidade de controle do pacote de ondas tanto na sua direção de propagação como também a velocidade em que esse elétron se deslocará. No segundo trabalho incluímos a interação elétron-elétron e investigamos quais a relação de aplicarmos um pulso elétrico gaussiano e o grau de emaranhamento das duas partículas. Vimos que além de promover o transporte unidirecional dos dois elétrons controlando sua direção e velocidade, conseguimos controlar a dinâmica da banda de estados ligados e estados não-ligados separadamente. Além disso, apresentamos que para os campos com intensidade máxima $I = \pi/2$ e $I = 3\pi/2$ e uma interação elétron-elétron intermediária, as duas partículas apresentam um grau de máximo emaranhamento. Por fim, no último trabalho, estudamos as consequências da interação elétron-fônon acarreta a um sistema de partícula única sob ação de um campo elétrico pulsado. Nossos cálculos sugerem que a aplicação de um campo elétrico pulsado E_p em uma cadeia não-linear, é capaz de criar auto-estados armadilhados e promover uma transporte unidirecional. Além disso, as singularidades do campo nos permite controlar a velocidade de propagação desses modos auto-armadilhados como também a direção desse movimento. Através de um mapeamento numérico conseguimos caracterizar nosso sistema em cinco regiões.

Palavras-chave: 1. Campo elétrico pulsado. 2. Elétrons interagentes. 3. Partículas correlacionadas. 4. Cadeia não-linear.

Abstract

The manipulation and control of stable and spatially located across external fields is a very attractive object from a scientific and technological point of view. Understanding how the behavior of particles under the action of driving fields allows us to apply directly to current technologies such as effecting storage of quantum states and coherent transfer of information quantum theory. Electronic dynamics control can provide us with access to computational tasks efficiently. In this dissertation, we investigated the role of some ingredients on electron dynamics in a crystalline chain under the action of a pulsed electric field, such as: the Hubbard electron-electron interaction and the electro-phonon coupling. We work with numerical models of nanostructured systems destined to the solution of the time-dependent Schrödinger equation. We present an excellent agreement between the results obtained numerically with the semi-classical approach. In the first work we model an electron in a crystalline chain 1d under the action of a pulsed external field. We show that when we apply a sequence of electrical pulses we have the appearance of a new behavior of the electronic wave packet. If we connect the field electric pulsed in just an instant of time, giving a moment initial the particle, the electron performs a one-way motion. We present the possibility of controlling the wave packet both in its direction of propagation as well as the speed at which this electron will move. In the second work we include the electron-electron interaction and investigate the relation of applying a Gaussian electric pulse and the the degree of entanglement of the two particles. We saw that beyond promote the unidirectional transport of the two electrons controlling direction and speed, we have managed to control the dynamics of connected states and non-connected states separately. Besides that, we show that for the fields with maximum intensity $I = \pi/2$ e $I = 3\pi/2$ and an intermediate electron-electron interaction, the two particles have a degree of maximum entanglement. Finally, in the last work, we studied the consequences of the interaction electron-phonon entails a single particle system under the action of a field electric pulsed. Our calculations suggest that the application of a pulsed electric E_p in a nonlinear chain, is able to create self-trafficking and promote one-way transport. In addition, the singularities of the field allows us to control the propagation speed of these modes self-trapping as well as the direction of this movement. Across numerical mapping we can characterize our system in five regions.

Keywords: 1. Pulsed electric field. 2. Interacting electrons. 3. Correlated particles. 4. Non-linear chain.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Padrão típico de um potencial cristalino. Todos os íons da rede são iguais, representado pelos pontos preenchidos e estão equidistantes um do outro por uma distância a	17
Figura 2 – Dinâmica de um elétron sob a influência de um campo elétrico constante. (a) Relação energia versus vetor de onda \vec{k} no espaço recíproco. (b) Relação velocidade versus vetor de onda \vec{k} no espaço real.	22
Figura 3 – Em (a-c) temos a posição média $\langle x(t) \rangle$ de um pacote de ondas gaussiano de largura inicial $\sigma = 1, 0$, disposto inicialmente no centro de em uma cadeia unidimensional com $N = 100$ sítios sob ação de um campo elétrico constante E . Em (b-d) a transformada de Fourier $\langle x(\omega) \rangle$ mostra um comportamento oscilatório com frequência $\omega = E$	23
Figura 4 – Esquema para uma transição metal-isolante utilizando teoria de bandas para o caso de Bloch. Temos que a transição ocorre devido à mudança na estrutura da banda que remove a sobreposição entre as bandas preenchidas e vazias.	24
Figura 5 – Representação dos átomos em forma de poços de potenciais e o elétron de valência de cada átomo ocupando um nível de energia que, na figura, é representado pelas linhas horizontais	25
Figura 6 – No painel superior temos a probabilidade de retorno $R(t_\infty)$ em um tempo longo em função de χ . Enquanto que no painel inferior temos a função participação $P(t_\infty)$ para cada valor de χ . Utilizamos um pacote de ondas tipo delta localizado inicialmente no centro de uma cadeia com $N = 1000$ sítios.	29
Figura 7 – Em (a) Configuração experimental de uma cadeia de aproximadamente 50 átomos sob efeito de um campo externo formado pela superposição de uma força constante e uma dependente do tempo. Em (b) Posição média do pacote de ondas em uma cadeia com $N = 500$ sítios sob ação de um campo elétrico externo formado pela superposição de um campo constante e outro harmônico. Mostramos três curvas para direntes valores de ϕ	31
Figura 8 – Evolução temporal do centroide para diferentes larguras do pacote de onda. Utilizamos uma rede com $N = 500$ sítios, $\sigma = 0, 1; 1, 0$ e 30 . Adotamos a seguinte configuração para o campo elétrico. $F_0 = 0, 6$, $\Delta F = 0, 8F_0$, $\phi = 0$ e $\omega = \omega_{\text{Bloch}}$	32
Figura 9 – Evolução temporal do pacote de onda em uma rede cristalina com $N = 500$ sítios. Consideramos inicialmente uma função de onda do tipo gaussiana de largura $\sigma = 1$ e centrada o sítio $n_0 = N/2$. Não há campo elétrico aplicado sob o sistema, $E(t) = 0$	35

Figura 10 – Evolução temporal do pacote de onda em uma rede cristalina com $N = 500$ sítios conduzido por um campo elétrico pulsado. Consideramos uma função de onda do tipo gaussiana de largura $\sigma = 1$ e centrada no sítio $n_0 = N/2$. Ligamos o campo em quatro instantes de tempo, $\tau = 10, 40, 70, 100$. Em (a) evolução da densidade de probabilidade $ \phi_n ^2$, (b) temos a dinâmica da posição média do pacote de onda a cada pulso elétrico aplicado.	36
Figura 11 – Deslocamento quadrático médio para uma cadeia cristalina com $N = 500$ sítios. Ligamos campo pulsado em quatro instantes de tempo, $\tau = 10, 40, 70, 100$.	37
Figura 12 – Probabilidade de retorno obtida do Hamiltoniano de ligação apertada (<i>tight-binding</i>) de um elétron, em uma cadeia cristalina pura com $N = 500$ sítios sob a influência de um campo elétrico pulsado, aplicado em $\tau = 10, 40, 70, 100$.	38
Figura 13 – Cálculo numérico do centroide e do deslocamento médio quadrático. Para a simulação, consideramos dois valores de impulsos distintos. Em (a) temos o perfil do campo elétrico pulsado com uma intensidade equivalente a $I = \pi/2$ e em (b) com intensidade $I = \pi/4$. Em (c) temos os resultados para $I = \pi/2$ representado pela curva tracejada e $I = \pi/4$ pela curva contínua. Os cálculos foram feitos para um pacote de onda com $\sigma = 1.0$ numa cadeia unidimensional com $N = 500$ sítios.	39
Figura 14 – Centroide em função do tempo para um pacote de ondas gaussiano com largura em (a) $\sigma = 1, 0$ e (b) $\sigma = 4, 0$ em uma cadeia cristalina pura com $N = 2000$ sítios, sob a influência de apenas um pulso elétrico aplicado em $\tau = 10$ (u.t.), alteramos apenas a intensidade do campo em $I = \pi/2, \pi/4, \pi, 5\pi/4$ e $3\pi/2$. Em (c) e (d) temos a proporção do deslocamento quadrático médio para um tempo longo em razão do deslocamento quadrático médio inicial, ξ_∞/ξ_0 . Em (c) $\sigma = 1, 0$ e (d) $\sigma = 4, 0$	40
Figura 15 – Velocidade de grupo média em função de cada impulso aplicado. Variamos a largura inicial do pacote de ondas gaussiano em $\sigma = 1, 0$ até $\sigma = 8, 0$	41
Figura 16 – Esquema de uma rede quadrada de guia de ondas com uma diagonal formada por guias de ondas com índice de refração diferente das demais, simulando o Hamiltoniano de Hubbard para dois elétrons de spins opostos.	44
Figura 17 – Densidade de estado para duas partículas interagentes em uma cadeia unidimensional com $N = 1000$ sítios. Em (a) $U = 0$ resgata as características de partícula única em uma rede 2d. (b) $U = 2$ vemos a superposição da banda principal com o surgimento de uma sub-banda. Quando $U = 4$ em (c), temos o limiar da separação entre as duas bandas. Por fim, em (d) com $U = 7$ temos a banda de estados ligados completamente separa da banda principal.	51

Figura 18 – Evolução temporal da posição média de uma partícula em uma cadeia com $N = 750$ sítios para quatro configurações de campos elétricos pulsados, aplicados em $\tau = 10$ (unidade de tempo). Os impulsos resultantes do campo elétrico são $I = \pi/2, 3\pi/4, 5\pi/4$ e $3\pi/2$. Observa-se que a dinâmica exibida pelas partículas quando a força de interação entre elas é $U = 4, 0$ é distinto do fornecido pelas partículas não interagentes ($U = 0$).	52
Figura 19 – Velocidade média do centroide para cada impulso para as interações (a) $U = 0, 0$; (b) $U = 4, 0$ e (c) $U = 10, 0$. Utilizamos duas condições iniciais para a largura do pacote de ondas $\sigma = 1, 0$ e $\sigma = 4, 0$. Para $U = 0, 0$ o comportamento senoidal corrobora com a descrição semi-clássica para o caso de partículas não interagentes. Por outro lado, quando ligamos a interação entre, a dinâmica das partículas passa a apreensetar uma dependência com a banda de estados ligados.	54
Figura 20 – Probabilidade de dupla ocupação $PDDO = \sum_{n_1} \langle \phi_{n_1, n_1} ^2 \rangle$ em função da energia de interação elétron-elétron U para diferentes larguras de pacotes de ondas $\sigma = 1, 0; 2, 0; 4, 0$ e $6, 0$. Observa-se que existe um valor de U onde a probabilidade de dupla ocupação é máxima. A medida em que aumentamos a largura inicial do pacote de ondas, a probabilidade de dupla ocupação diminui.	55
Figura 21 – Evolução do perfil da densidade de probabilidade $ \phi ^2$. Em (a) temos a ausência de interação entre as partículas $U = 0$. Em (b) temos uma força de interação elétron-elétron intermediária $U = 4$. Ligamos o campo elétrico pulsado em $\tau = 10$ (unidade de tempo) com impulso total de $I = 5\pi/4$ para (a) e (b).	56
Figura 22 – Em (a) Pureza $P(t)$ para cada valor de U . Utilizamos diversos valores para o impulso elétrico. Observamos que para os impulsos que promovem a velocidades máxima ($I = \pi/2, 3\pi/2$) para a banda de estados não ligados, o grau de emaranhamento entre os dois elétrons é maior. Em (b) Evolução temporal da função pureza $P(t)$. Utilizamos três intensidades de interação: $U = 0, 2$ e 10 . Para uma força intermediária de interação, a evolução temporal indica que o pacote de ondas desenvolve um aumento continuamente crescente de emaranhamento quântico quando o pulso elétrico promove maior velocidade a banda de estados ligados	57
Figura 23 – Evolução da distribuição do parâmetro de ordem escalonado r_n de um polaron movendo-se em uma cadeia com 300 sítios sob ação de um campo externo $E_0 = 1, 0mV/\text{Å}$	60
Figura 24 – Na coluna da esquerda (a1) e (b1) temos a evolução da distribuição do parâmetro de ordem escalonado δ_n . Na coluna da direita (a2) e (b2) temos a distribuição de carga ρ_n entre os dois polarons de elétrons com spins paralelos e antiparalelos para uma intensidade de campo elétrico intermediária, $E_0 = 1, 5mV/\text{Å}$	61

Figura 25 – Evolução temporal do centroide de pacote de ondas inicialmente tipo delta em uma cadeia cristalina não-linear com $N = 2000$ sítios, disposto inicialmente em $n_0 = N/2$ sob a ação de campos elétricos pulsados com intensidades $E_p = 0, 25; 0, 5; 1, 0; 1, 25$ e $1, 5$. Em (a) foi utilizado um parâmetro de acoplamento elétron-fônon $\chi = 1, 5$ e (b) $\chi = 3, 5$	64
Figura 26 – Velocidade média do centroide do elétron em uma rede cristalina sob ação de um campo pulsado aplicado em $\tau = 3, 5$ (u.t.). Variamos o parâmetro que regula a intensidade da interação elétron-fônon de $\chi = 0$ até $\chi = 3, 5$. Mostramos que a medida em que vamos aumentando o valor de χ , o centroide da partícula adquire mobilidade, alcançando sua velocidade média máxima em $\chi \approx 3, 5$	65
Figura 27 – Diagrama de fase do acoplamento elétron-fônon \times do campo elétrico pulsado aplicado. A intensidade das cores são de acordo com a média da densidade de probabilidade máxima no limite assintótico $ \phi_n(t_\infty) ^2$	66
Figura 28 – Diagrama de fase do acoplamento elétron-fônon \times do campo elétrico pulsado aplicado. A intensidade das cores são de acordo com a velocidade de grupo média $\langle v(t) \rangle$	67
Figura 29 – Perfil da evolução temporal da densidade de probabilidade $ \phi_n ^2$ em uma cadeia com $N = 4000$ sítios e acoplamento elétron-fônon $\chi = 1, 5$. Em (a) aplicamos um campo elétrico pulsado $E_p = 0, 5$ e (b) $E_p = 1, 5$	68
Figura 30 – Utilizamos uma cadeia cristalina com $N = 10^4$ sítios e ligamos o campo elétrico pulsado no instante $\tau = 3, 5$ (u.t.). A intensidade de acoplamento elétron-fônon foi mantida fixa em $\chi = 1, 5$ para todos os resultados. Dividimos a figura em <i>a</i> e <i>b</i> para as intensidades de campo elétrico pulsado $E_p = 0, 5$ e $1, 5$, respectivamente. Em (a.1), (b.1) temos a densidade de probabilidade máxima $ \phi_n _{\max}^2$ de encontramos a partícula em um sítio n no tempo t . Em (a.2), (b.2) calculamos a função participação para o lado esquerdo (esq) e para o lado direito (dir) de n_0 . Já em (a.3), (b.3) temos a probabilidade de retorno no sítio inicial, ou seja, em $n_0 = N/2$	69
Figura 31 – Perfil da evolução temporal da densidade de probabilidade $ \phi_n ^2$ em uma cadeia com $N = 4000$ sítios e acoplamento elétron-fônon $\chi = 6$. Em (a) aplicamos um campo elétrico pulsado $E_p = 0, 5$ e (b) $E_p = 1, 5$	70
Figura 32 – Mantemos $\chi = 6, 0$ para todos os resultados. Dividimos a figura em <i>a</i> e <i>b</i> para as intensidades de campo elétrico pulsado $E_p = 0, 5$ e $1, 5$, respectivamente. Em (a.1), (b.1) temos a densidade de probabilidade máxima $ \phi_n _{\max}^2$ de encontramos a partícula em um sítio n no tempo t . Em (a.2), (b.2) calculamos a função participação para o lado esquerdo (esq) e para o lado direito (dir) de n_0 . Já em (a.3), (b.3) temos a probabilidade de retorno no sítio inicial, ou seja, em $n_0 = N/2$	71

Figura 33 – Evolução temporal da densidade de probabilidade de pacote de ondas inicialmente tipo delta	86
Figura 34 – Evolução temporal da densidade de probabilidade para um pacote de ondas inicialmente gaussiano.	87
Figura 35 – Evolução temporal da posição média do pacote de onda para uma rede com $N = 500$ sítios. A intensidade do campo externo nas duas configurações $F = 0.5$. Em (a) a função de onda inicial é uma delta, localizada em $n_0 = 250$. Em (b) a distribuição é uma gaussiana com largura $\sigma = 1$, centrada inicialmente em $n_0 = 250$	92

Sumário

1	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
1.1	Desenvolvimento histórico	15
1.2	Teorema de Bloch	16
1.3	Presença de Campo Elétrico	19
1.4	Interação elétron-elétron	23
1.5	Interação elétron-fônon	26
2	DINÂMICA DE UM ELÉTRON NA PRESENÇA DE CAMPO PUL- SADO	30
2.1	Modelo e Formalismo	32
2.2	Resultados	34
2.3	Conclusões	41
3	CAMINHADA QUÂNTICA UNIDIRECIONAL DE DUAS PARTÍCULAS CORRELACIONADAS	43
3.1	Modelo e Formalismo	45
3.2	Resultados	50
3.3	Conclusões	58
4	CRIAÇÃO E TRANSPORTE DE ESTADOS AUTO-ARMADILHADOS EM CADEIAS NÃO-LINEARES	59
4.1	Modelo e Formalismo	62
4.2	Resultados	63
4.3	Conclusões	71
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	73
	REFERÊNCIAS	75
	APÊNDICES	82
	APÊNDICE A – CAMPO ELÉTRICO E OSCILAÇÕES DE BLOCH	83
A.1	Valores esperados de posição	87

ANEXOS	93
ANEXO A – WAVE PACKET DYNAMICS UNDER EFFECT OF A PULSED ELECTRIC FIELD	94
ANEXO B – UNIDIRECTIONAL QUANTUM WALK OF TWO CORRELATED PARTICLES: MANIPULATING BOUND-PAIR AND UNBOUND WAVE-PACKET COMPONENTS . .	100
ANEXO C – CREATION AND MOBILITY OF SELF-TRAPPED ELECTRONIC STATES IN NONLINEAR CHAINS	106

1 Fundamentação Teórica

Esse primeiro capítulo tem como objetivo trazer ao leitor alguns dos principais fenômenos característicos do comportamento de partículas em sistemas de baixa dimensionalidade na presença dos ingredientes presentes nos modelos por nós estudandos, como campos elétricos externos, interação entre as partículas e interação elétron-fônon. Na seção 1.1, iniciamos com um breve apanhado histórico sobre a teoria dos metais, permeando desde o modelo clássico de Drude até a aplicação da mecânica quântica com o modelo de Bloch. Dedicamos uma seção para tratar exclusivamente sobre o modelo de Bloch (seção 1.2), onde veremos que a natureza quântica do elétron em conjunto com o potencial cristalino nos permite explicar fenômenos até então não explicados. Na seção 1.3 descreveremos a dinâmica de uma partícula quando submetida a ação de um campo elétrico. Veremos que a depender das características do campo elétrico aplicado, a dinâmica da partícula apresenta respostas diferentes, nos levando a diversos fenômenos, com por exemplo as oscilações de Bloch (*Bloch Oscillations*). Em seguida, na seção 1.4, descreveremos o papel da interação elétron-elétron em alguns sistemas de grande e pequena densidade eletrônica. Por fim, trataremos na seção 1.5 de modelos onde a interação entre o elétron e os modos vibracionais da rede apresentará um papel importante na dinâmica eletrônica.

1.1 Desenvolvimento histórico

Após a descoberta do elétron em 1897 por J. J. Thomson, começaram a surgir modelos que tentavam explicar o comportamento dos recém descobertos elétrons em materiais, em especial os metais. A teoria dos metais segundo (BASSALO, 1993; BASSALO, 1994; HODDESON; BAYM; ECKERT, 1987) divide-se em três categorias, que são:

1. O *período clássico* tem seu início datado no ano de 1900. Marcado pelo desenvolvimento da teoria de Drude (DRUDE, 1900) que tenta, por meio de um formalismo puramente clássico, explicar propriedades térmicas e elétricas dos metais. Para Drude, os elétrons eram as únicas cargas que movimentavam-se no material, de modo que, seu modelo baseia-se essencialmente no uso da teoria cinética dos gases para um metal.

2. O *período semi-clássico* ocorreu entre o rápido intervalo de 1926 e 1928, onde caracteriza-se pela substituição da distribuição de Maxwell-Boltzmann clássica, utilizada por Drude em sua teoria, pela recém elaborada estatística de Fermi-Dirac (FERMI, 1926; DIRAC, 1926). Em 1926, W. Pauli aplicou a teoria que explicava o comportamento de férmions ao fenômeno de condução de elétrons em metais para explicar seus comportamentos paramagnéticos (JOAS, 2010).

Em 1927, A. Sommerfeld, aplicou a nova estatística ao modelo de Drude para explicar a condutividade de metais (JOAS, 2010). O modelo de Sommerfeld também desconsidera a

interação entre os elétrons e os íons.

3. O *período quântico*, iniciado em 1928, quando Felix Bloch (BLOCH, 1929) levou em consideração, em sua tese de doutoramento, a presença da estrutura iônica. Através do seu modelo foi possível entender as propriedades da função de onda eletrônica. Tal estudo será visto em detalhes na próxima seção.

Em 1937, os autores (BOER; VERWEY, 1937) chamam a atenção para um grupo de semicondutores que não estavam corroborando com o modelo desenvolvido por Bloch. Nesse trabalho os autores apresentam resultados experimentais desenvolvidos em amostras de óxido de níquel II (NiO) e óxido cuproso (Cu_2O), conhecidos como óxido de metais de transição. Estes materiais mesmo possuindo uma banda de condução parcialmente preenchida, se comportavam experimentalmente como um isolante. Estes resultados mostraram que, apesar do Modelo de Bloch ter apresentado uma teoria para explicar a condutividade dos metais, estava incompleto.

Em 1968, o autor (MOTT, 1968) descreve em seu trabalho os efeitos da interação Coloumbiana entre os elétrons da rede. Mostrou a existência de uma transição metal-isolante, conhecida na literatura como *transição de Mott*. Em uma transição de Mott, o elétron que se desloca pela cadeia pode naturalmente ao chegar em um determinado orbital poderá encontrá-lo ocupado. Nesse caso, como há a existência de interação entre as partículas, ocorrerá uma interação repulsiva entre eles, cuja energia dessa interação é dada por:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{12}} \right) \quad (1.1)$$

onde ϵ_0 é a permissividade do vácuo e r_{12} a distância entre os elétrons. Desta forma, existe um valor crítico para o custo energético dessa dupla ocupação que faz com que a interação elétron-elétron iniba a propagação da partícula e o sistema apresente um comportamento isolante.

1.2 Teorema de Bloch

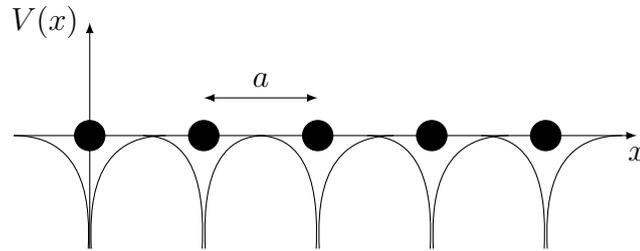
Como visto na seção anterior, Bloch foi o primeiro a empregar um tratamento puramente quântico na tentativa de explicar a condutividade dos metais. Em seu modelo, assumiu que todos os íons da rede são iguais, estão igualmente espaçados e utilizou uma aproximação de elétrons independentes. Neste caso, a única interação existente no sistema é entre os elétrons de valência e os íons da rede, representado por um potencial iônico $V(\mathbf{x})$. Assim podemos escrever, para o caso unidimensional, que:

$$V(x) = V(x + za) \quad (1.2)$$

onde z é um número inteiro e a é a magnitude do vetor de rede, como podemos ver na figura 1.

Dessa forma, Bloch tinha como objetivo encontrar uma função de onda que confinada a um potencial periódico qualquer, do tipo da equação (1.2), de modo a satisfazer a equação de

Figura 1 – Padrão típico de um potencial cristalino. Todos os íons da rede são iguais, representado pelos pontos preenchidos e estão equidistantes um do outro por uma distância a .



Fonte: Do autor, 2018.

Schrödinger $H\psi = E\psi$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi = E\psi \quad (1.3)$$

onde o primeiro termo representa a componente cinética da partícula, m é a massa da mesma e \hbar é a constante de Planck. O segundo termo representa o potencial iônico $V(x)$ que possui a mesma periodicidade da rede. Utilizando ferramentas de Teoria de Grupos e expansões em séries de Fourier podemos resolver a equação de Schrödinger e demonstrar que a função de onda do elétron em um autoestado de energia de uma rede pura unidimensional é dada pela função $\psi(x) = u(x)e^{ikx}$.

Inicialmente vamos considerar um potencial periódico unidimensional qualquer $V(x) = V(x + za)$, de modo que, podemos realizar uma expansão em séries de Fourier:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \exp\left[\frac{i2\pi xn}{a}\right], \quad (1.4)$$

$$V_n = \frac{1}{a} \int_0^a V(x) \exp\left[\frac{i2\pi xn}{a}\right]. \quad (1.5)$$

Para evitarmos problema com efeitos de borda vamos utilizar condições de contorno periódicas, conhecidas também como condições de contorno de Born-von Karman¹. Assumimos que o material unidimensional não é mais retilíneo e sim, conectado formando um anel. Assim, temos:

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

onde N representa o número de vetores primitivos.

Escrevendo também a função de onda em termos de séries de Fourier,

$$\psi(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \psi_k \exp\left[\frac{i2\pi xk}{Na}\right] \quad (1.7)$$

¹ Ashcroft, Neil W.; Mermin, N. David (1976). Solid state phys. New York, Holt, Rinehart and Winston. p. 135. ISBN 978-0-03-083993-1.

$$\psi_n = \frac{1}{a} \int_0^a \psi(x) \exp \left[\frac{i2\pi xk}{a} \right] \quad (1.8)$$

e substituindo as equações 1.4 e 1.7 em 1.3 obtemos que

$$\sum_k \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_n V_n \exp \left(\frac{i2\pi xn}{a} \right) \right] \psi_k \exp \left[\frac{i2\pi xk}{Na} \right] = \sum_k E \psi_k \exp \left[\frac{i2\pi xk}{Na} \right] \quad (1.9)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \sum_k \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{i2\pi k}{Na} \right)^2 - E \right] \psi_k \exp \left(\frac{i2\pi xk}{Na} \right) + \\ \sum_k \sum_n V_n \psi_{k-Nn} \exp \left[i2\pi xk \left(\frac{n}{a} + \frac{k}{Na} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

Realizando uma mudança de variável $\frac{k}{Na} \rightarrow \frac{k-Nn}{Na}$ e mantendo-se no intervalo em que o somatório está sendo realizado, podemos escrever que:

$$\begin{aligned} \sum_k \left[\frac{2\pi^2 k^2 \hbar^2}{2N^2 a^2} - E \right] \psi_k \exp \left(\frac{i2\pi xk}{Na} \right) + \sum_k \sum_n V_n \psi_{k-Nn} \times \\ \exp \left[i2\pi xk \left(\frac{n}{a} + \frac{k-Nn}{Na} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (1.11)$$

$$\sum_k \exp \left(\frac{i2\pi xk}{Na} \right) \left[\left(\frac{2\pi^2 k^2 \hbar^2}{2N^2 a^2} - E \right) \psi_k + \sum_n V_n \psi_{k-Nn} \right] = 0 \quad (1.12)$$

Uma vez que a função deve ser satisfeita para quaisquer valores de x , todos os termos que multiplicam a exponencial de x devem ser nulos

$$\left(\frac{2\pi^2 k^2 \hbar^2}{2N^2 a^2} - E \right) \psi_k + \sum_n V_n \psi_{k-Nn} = 0. \quad (1.13)$$

A equação 1.13 faz parte de um conjunto de equações lineares que possuem soluções não triviais. No entanto, se conhecermos o comportamento de V_n conseguimos mostrar que, exceto para a condição $k = k_0 < N$, os ψ_{k_0+Nn} são não nulos $\forall n$ inteiro. Escrevendo esses possíveis valores de ψ_n em função da expansão de Fourier temos

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_{k_0+Nn} \exp \left[\frac{2i\pi x(k_0 + Nn)}{Na} \right] \\ &= \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_{k_0+Nn} \exp \left(\frac{2i\pi xk_0}{Na} \right) \right] \exp \left(\frac{2i\pi xNn}{Na} \right) \end{aligned}$$

ou ainda, definindo que

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_{k_0+Nn} \exp \left(\frac{2i\pi xk_0}{Na} \right) \quad (1.14)$$

onde $u(x)$ possui a mesma periodicidade da rede e k_0 pode assumir valores apenas dentro da primeira zona de Brillouin.

Desta forma, Bloch encontrou que os autoestados ψ que satisfazem a equação de Schrödinger para um potencial periódico são dados pelo produto de uma função $u(x)$ que conserva a periodicidade da rede por uma onda plana $\exp(2i\pi xn/a)$, ou seja,

$$\psi(x) = u(x) \exp\left(\frac{2i\pi xn}{a}\right). \quad (1.15)$$

A partir desse modelo, ficou demonstrado que a função de onda de um elétron poderia se mover livremente por toda a estrutura cristalina. Ou ainda, que a função de onda eletrônica se estende por todo o sistema. Outra contribuição importante foi a possibilidade de distinguir condutores e isolantes. Essa distinção possui relação direta com o surgimento de bandas de energia proibidas como consequência da estrutura periódica cristalina.

1.3 Presença de Campo Elétrico

Entender o comportamento dos elétrons em meios condutores quando sujeitos a uma diferença de potencial é de grande interesse tanto para a física teórica do estado sólido como também para as engenharias com suas aplicações. Na teoria do elétron livre, ao aplicarmos um campo elétrico uniforme paralelo à cadeia teríamos que o elétron realizaria uma dinâmica uniformemente acelerada, como previsto através das equações clássicas do movimento. Quando consideramos o elétron de Bloch em uma cadeia cristalina sob a ação de um campo elétrico constante, a resposta da função de onda deixa de ser uniformemente acelerada e passa a apresentar uma dinâmica não intuitiva. A periodicidade do potencial $V(x)$ apresenta um papel fundamental no comportamento do pacote de ondas eletrônico. O elétron, agora, realiza oscilações coerentes com uma frequência proporcional a intensidade do campo externo aplicado. Essas oscilações são conhecidas na literatura como *Oscilações de Bloch* (ASHCROFT; MERMIN, 1976; FELDMANN et al., 1992; HARTMANN et al., 2004). Explicaremos a seguir o fenômeno à luz do modelo semi-clássico.

A abordagem semi-clássica consiste em uma generalização da teoria do elétron livre para o caso de um potencial espacialmente periódico. Ou seja, substituiremos o momento clássico da partícula pelo momento utilizado na mecânica quântica $\vec{p} \rightarrow \hbar\vec{k}$. Seja o hamiltoniano do sistema de um elétron em uma cadeia cristalina sob ação de um campo elétrico constante dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - eEx, \quad (1.16)$$

onde $-e$ é a carga da partícula e E o campo elétrico constante. Partindo das equações de

Hamilton podemos escrever :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \quad (1.17)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}}. \quad (1.18)$$

Sendo $d\vec{r}/dt = \vec{v}$, podemos utilizar a primeira equação para encontrar uma expressão para a velocidade do pacote de ondas

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left[\varepsilon \left(\frac{\vec{p}}{\hbar} \right) + V(x) - eEx \right] \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Assim, temos que a equação (1.19) determina a velocidade de grupo da partícula.

Com a segunda equação de (1.17), podemos encontrar a equação horária no espaço \vec{k} , vejamos:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \quad (1.20)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\frac{d}{dx} [V(\vec{x}) - eEx] \quad (1.21)$$

como $V(x)$ é constante, o lado direito da equação (1.21) resulta na força proporcionada sobre o elétron devido à presença do campo. Assim temos:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -eE. \quad (1.22)$$

Podemos observar que a variação temporal de \vec{k} é diretamente proporcional ao campo elétrico. Integrando a equação 1.22 obtemos uma equação horária do movimento uniforme no espaço \vec{k} :

$$\vec{k}(t) = \frac{-eE}{\hbar} t + \vec{k}_0. \quad (1.23)$$

Para distinguirmos mais precisamente a diferença entre o comportamento de um elétron livre e um elétron sob um potencial periódico, temos que levar em consideração o fato de que o espaço \vec{k} é dividido em zonas de Brillouin e nessa região existe uma relação da energia com o vetor de onda $\varepsilon_n(\vec{k})$. Na figura 2 temos o comportamento de uma partícula numa banda. Em (a) temos a representação da Energia E em função do vetor de onda \vec{k} . Em (b) temos a dependência da velocidade de grupo \vec{v}_g com \vec{k} .

Com o campo elétrico desligado, o elétron encontra-se no estado em que $\vec{k} = \vec{k}_0 = 0$ de modo que sua velocidade é nula $\vec{v} = (1/\hbar)\partial\varepsilon/\partial\vec{k} = 0$. Quando o campo elétrico é aplicado na direção negativa do eixo x, devido ao valor da carga ($-e$), o vetor de onda \vec{k} do elétron percorre

os estados até chegar no ponto A . O ponto A é idêntico ao ponto A' , no entanto, estão separados por um vetor da rede recíproca $2\pi/a$. Considerando a representação de zona repetida, quando a partícula chegar no ponto A , o vetor de onda eletrônico sai da primeira zona de Brillouin e entra na próxima zona, que possui as mesmas características da primeira. Levando em consideração ainda o esquema de zona reduzida, uma vez que a função $\varepsilon(\vec{k})$ é periódica, podemos representar a mudança de sentido do vetor de onda \vec{k} com o tempo como um processo periódico no qual o ponto \vec{k} vai de A' até A , de modo que repetirá o ciclo, esse ciclo é conhecido como reflexões de Bragg. Com isso, temos que a energia da partícula realiza oscilações entre $\varepsilon(A')$ e $\varepsilon(A)$. Correlacionado a este fenômeno, existe uma oscilação da velocidade \vec{v} no espaço real, uma vez que, a velocidade da equação (1.19) muda periodicamente de sinal.

Como estamos entendendo um movimento oscilatório se faz interessante calcularmos o período de oscilação. Adotando que o vetor de onda \vec{k} está inicialmente em A' , temos

$$\begin{aligned}\vec{k}(0) &= \vec{k}_0 = -\frac{\pi}{a} \\ \vec{k}(t_{os}) &= \frac{-eE}{\hbar}t_{os} - \frac{\pi}{a} \\ \frac{\pi}{a} + \frac{\pi}{a} &= \frac{-eE}{\hbar}t_{os}\end{aligned}$$

segue que:

$$\begin{aligned}\frac{2\pi}{a} &= \frac{(-e)E}{\hbar}t_{os} \\ t_{os} &= \tau = \frac{2\pi\hbar}{(-e)Ea},\end{aligned}\tag{1.24}$$

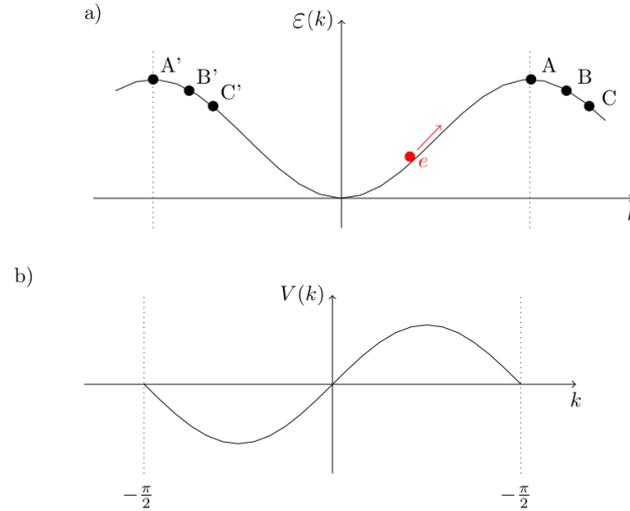
onde τ é o período de oscilação. Uma vez determinado o tempo necessário para a partícula realizar uma oscilação completa, podemos calcular a frequência dessa oscilação. Vejamos:

$$\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \frac{(-e)Ea}{\hbar}.\tag{1.25}$$

Através do formalismo semi-clássico obtivemos que a frequência de oscilação é diretamente proporcional a intensidade do campo elétrico. Uma outra medida interessante que podemos obter diante dos cálculos apresentados, é a amplitude de oscilação da função de onda eletrônica. Ela nos informará se o elétron de fato encontra-se dentro da primeira zona de Brillouin. Sendo as funções $\varepsilon(\vec{k})$, \vec{r} e \vec{k} contínuas em todo o intervalo de $[-\pi/a, \pi/a]$, podemos através da equação 1.19 escrever que:

$$\begin{aligned}\vec{r}(t) - \vec{r}_0 &= \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} dt \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \frac{dt}{d\vec{k}} d\vec{k} \\ &= -\frac{1}{(-e)E} [\varepsilon(\vec{k}(t)) - \varepsilon_0(\vec{k}(0))],\end{aligned}\tag{1.26}$$

Figura 2 – Dinâmica de um elétron sob a influência de um campo elétrico constante. (a) Relação energia versus vetor de onda \vec{k} no espaço recíproco. (b) Relação velocidade versus vetor de onda \vec{k} no espaço real.



Fonte: Do autor, 2018.

a expressão $[\varepsilon(\vec{k}(t)) - \varepsilon_0(\vec{k}(0))]$ representa a largura da banda W , logo, a amplitude de oscilação é da forma

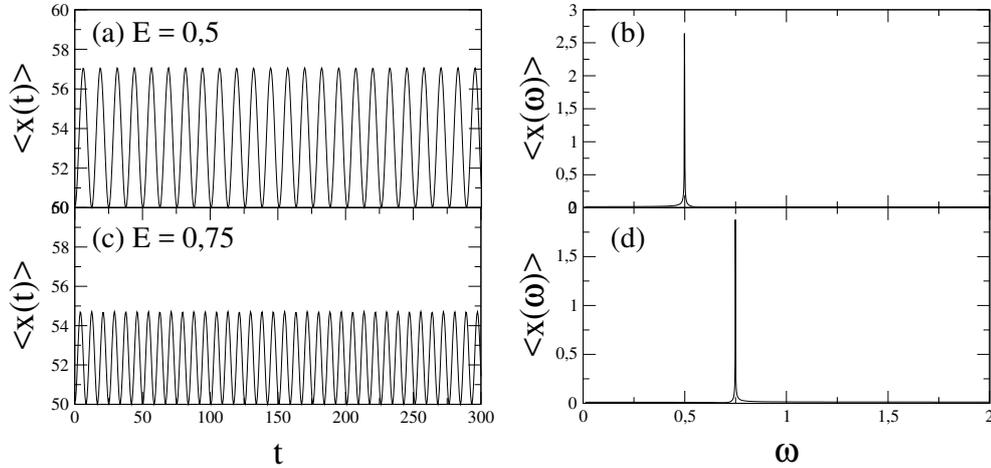
$$r_{max} = \frac{W}{eE}. \quad (1.27)$$

Aplicando um campo elétrico constante sob uma cadeia com um potencial periódico, o pacote de ondas realiza oscilações periódicas com uma frequência proporcional a intensidade do campo externo aplicado. Estas oscilações são conhecidas como oscilações de Bloch. Os elétrons apresentam oscilações com amplitudes constante ao longo do tempo. Este fenômeno também pode ser conhecido como localização dinâmica (DUNLAP; KENKRE, 1986). Os autores mostraram que uma força externa uniforme periódica pode controlar o espalhamento do pacote de ondas de uma partícula movendo-se em uma cadeia cristalina.

Podemos ver esse fenômeno através da figura 3, onde temos a simulação numérica de um elétron em uma rede cristalina sob ação de um campo elétrico constante. Em (a) temos a posição média do pacote de ondas quando um campo elétrico de intensidade $E = 0,5$ é aplicado paralelamente a cadeia. Em (b), é possível observar que a frequência de oscilação do elétron possui o mesmo valor que a intensidade do campo aplicado, corroborando assim com a equação (1.25). Na figura 3 (c) alteramos a intensidade do campo elétrico para $E = 0,75$. É interessante comentarmos que devido ao aumento da intensidade do campo, a amplitude de oscilação diminuiu, em total acordo com a descrição semi-clássica na equação (1.27).

Uma das dificuldades para a observação experimental das oscilações de Bloch em sólidos era a quantidade de energia necessária (alguns elétron-Volts) para que houvesse a reflexão de Bragg. Também não era possível trabalhar com energias altas, devido ao fato de que o

Figura 3 – Em (a-c) temos a posição média $\langle x(t) \rangle$ de um pacote de ondas gaussiano de largura inicial $\sigma = 1, 0$, disposto inicialmente no centro de em uma cadeia unidimensional com $N = 100$ sítios sob ação de um campo elétrico constante E . Em (b-d) a transformada de Fourier $\langle x(\omega) \rangle$ mostra um comportamento oscilatório com frequência $\omega = E$.



Fonte: Do autor, 2018.

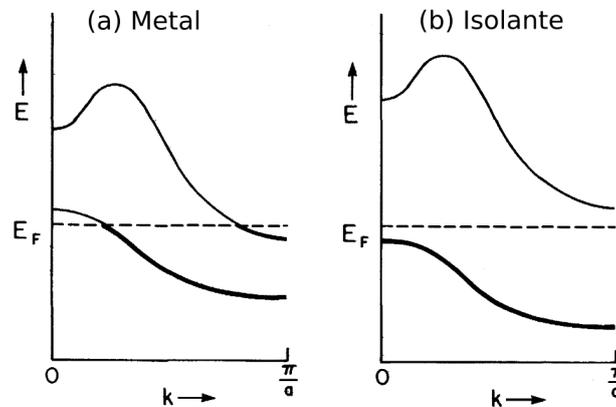
relaxamento por processos de dispersão é muito rápido, não fornecendo tempo suficiente para a realização de um período de oscilação completo. Essa questão do tempo de dispersão é importante, pois, se o elétron é espalhado muito antes de atingir uma das bordas da primeira zona de Brillouin ele se moverá sempre na direção do campo elétrico, ou seja, o resultado será análogo ao caso do elétron livre.

Com o avanço da tecnologia a ideia de oscilações de Bloch apenas no âmbito teórico foi abandonada. Os autores (LEO et al., 1992; LEO, 1998; FELDMANN et al., 1992; LYSSENKO et al., 1997) observaram experimentalmente este fenômeno através de superredes semicondutoras por experimentos ópticos. Outra observação experimental importante se deu através do resfriamento de átomos de Césio, pelos autores (DAHAN et al., 1996; PEIK et al., 1997), como também em condensado de Bose-Einstein (ECKARDT et al., 2009; CHOI; NIU, 1999; MORSCH et al., 2001; ANDERSON; KASEVICH, 1998). Isso nos mostra que, os aspectos especiais das oscilações de Bloch já encontram-se bastante explorados e conhecidos tanto no âmbito teórico quanto experimental.

1.4 Interação elétron-elétron

Pela teoria de bandas, temos que materiais que possuem bandas de energia completamente vazias ou completamente preenchidas apresentam um comportamento isolante. Enquanto que, os materiais que possuem bandas parcialmente preenchidas são classificados como metais. Em termos de energia de Fermi (E_F), temos que em um isolante este nível E_F encontra-se localizado em um gap de energia, figura 4 (b). Enquanto que em um metal teríamos E_F cortando a banda de energia, figura 4 (a).

Figura 4 – Esquema para uma transição metal-isolante utilizando teoria de bandas para o caso de Bloch. Temos que a transição ocorre devido à mudança na estrutura da banda que remove a sobreposição entre as bandas preenchidas e vazias.



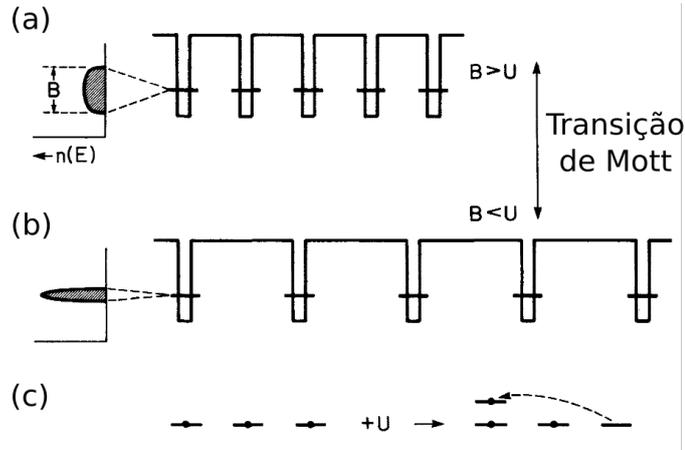
Fonte: Retirada da referência (ZALLEN, 2007). Tradução: Do autor, 2018.

O modelo proposto por Bloch consegue desvendar o comportamento isolante para sólidos através da utilização da teoria de bandas. Essa teoria aplica-se satisfatoriamente em grande parte dos casos, no entanto, apresenta inconsistências para alguns materiais. Um exemplo disso foi quando em 1938 os autores (VERWEY; BOER, 1938) apresentaram uma variedade de isolantes que possuem a camada 3d incompleta. Ou seja, materiais que deveriam ter um comportamento metálico seguindo a descrição da teoria de bandas mas, no entanto, apresentam uma resistividade com caráter isolante. Esse acontecimento abriu os olhos de que a teoria de Bloch para caracterização dos materiais estava indiscutivelmente incompleta.

Com isso, anos mais tarde, o físico Nevill Francis Mott propôs uma explicação para esse fenômeno, apresentando um modelo onde a interação elétron-elétron se fazia presente. O esclarecimento para tal comportamento, apresentado por alguns materiais, é que, devido a apresentar uma energia de interação elétron-elétron comparável ou dominante sobre a componente cinética (*hopping*) entre os orbitais vizinhos, surge um gap de energia, impedindo a condução. Desta forma, mostrou-se que a interação elétron-elétron é capaz de alterar as propriedades de transporte dos materiais. O caráter isolante em diversos sistemas passou a ter como causa as interações entre os elétrons da rede. Essa fase isolante ficou conhecida com *isolante de Mott*.

Na figura 5 temos uma representação dos átomos em forma de poços de potenciais e o elétron de valência de cada átomo ocupando um nível de energia que, na figura, é representado pelas linhas horizontais. No cristal, a medida em que os átomos são aproximados, os níveis de energia desdobram-se de modo que há o surgimento da largura de banda B , ver (a). A largura da banda B depende da distância entre os íons. No esquema de um átomo livre temos que a banda de energia se estende de $-B/2$ a $+B/2$. Para o caso em que a banda de energia seja meio preenchida, temos que a energia média de um elétron é em torno de $-B/4$. Essa queda na energia tem relação direta com a coesão cristalina.

Figura 5 – Representação dos átomos em forma de poços de potenciais e o elétron de valência de cada átomo ocupando um nível de energia que, na figura, é representado pelas linhas horizontais



Fonte: Retirada da referência (ZALLEN, 2007). Tradução: Do autor, 2018.

Já na figura 5 (b) temos a mesma representação dos átomos em forma de poços de potenciais. No entanto, agora, os níveis de energia são duplamente degenerados, de modo que, possuem dois elétrons de spins opostos (obedecendo o princípio da exclusão de Pauli). Cada nível de energia pode ter zero, um ou dois elétrons. Quando dois elétrons estão ocupando o mesmo sítio, sabemos que a interação possui um caráter repulsivo e isso faz com que a energia do nível atômico seja elevada, como podemos ver na figura 5 (c). A condição para termos um isolante de Mott é que o custo energético da dupla ocupação U seja maior que a largura da banda de energia B , figura 5 (b), assim teremos uma localização induzida pela interação elétron-elétron.

Um dos modelos mais utilizados para uma descrição da transição de Mott é o proposto por Hubbard, cujo o Hamiltoniano é composto apenas pelos dois termos responsáveis pela transição. Um termo que representa a energia cinética e outro para a a energia de interação elétron-elétron (LIEB; WU, 1968):

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1.28)$$

sendo c_i^\dagger (c_j) o operador de criação (aniquilação) no sítio i (j). O parâmetro t corresponde a amplitude de probabilidade para o elétron saltar (*hopping*) para os sítios primeiros vizinhos $\langle ij \rangle$. U representa o termo de interação de Hubbard quando os elétrons ocuparem o mesmo orbital (*on-site*).

A título de exemplificação, temos que um dos materiais que atualmente intriga a comunidade científica do ponto de vista de aplicações tecnológicas vem sendo o dióxido de vanádio (VO_2). Isso porque ele apresenta uma transição de fase a temperaturas próximas a ambiente. Ou seja, o material deixa de agir como um metal e passa a se comportar como um isolante.

E mais interessante ainda, é que essa transformação ocorre em uma curta escala de tempo. Acredita-se que, com um pequeno resfriamento, esse material pode se tornar útil para aplicações tecnológicas. No entanto, é preciso ainda desenvolver um melhor entendimento de como ocorrem essas mudanças de fase.

Foi com esse intuito que recentemente que os autores (BRITO et al., 2016) realizaram um estudo teórico da estrutura eletrônica do composto inorgânico VO_2 nas suas duas fases (no qual chamam no trabalho de M_1 para a fase metálica e M_2 para a isolante), utilizando a teoria de densidade funcional e dinâmica de campo médio. Os autores mostram que as transições de fases têm ligação fundamental com a física de Mott. Com isso, ainda mostraram que foi possível observar experimentalmente a conexão entre a transição e a elevação da temperatura.

O autor (SHEPELYANSKY, 1994) foi o pioneiro a considerar a interação de Hubbard entre duas partículas. Em seu trabalho, considerou que os elétrons interagem entre si quando estivessem no mesmo sítio (*on-site*) em um potencial iônico desordenado. Apesar de ser um modelo simples onde trata apenas a interação entre duas partículas, seus resultados recuperam fenômenos físicos importantes contidos em problemas de muitas partículas (MÜLLER-GROELING; WEIDENMÜLLER; LEWENKOPF, 1993). A proposta de (SHEPELYANSKY, 1994) trouxe a tona uma série de estudos sobre sistemas de duas partículas interagentes.

1.5 Interação elétron-fônon

Ao assumirmos que os íons da rede possuem uma pequena mobilidade de modo a realizarem pequenos movimentos oscilatórios em torno de uma posição de equilíbrio, a dinâmica da função de onda eletrônica pode ser significativamente alterada. A interação do elétron com esses modos vibracionais dá origem a um tipo de interação, conhecida na literatura como interação elétron-fônon. Um dos principais conceitos relacionados a estes sistemas é que, após a interação exceder um valor crítico ocorre um fenômeno de localização conhecido como auto-armadilhamento da função de ondas (*self-trapping*) (KENKRE; CAMPBELL, 1986).

Um dos pioneiros no estudo envolvendo a interação entre elétron e movimentos de vibração da rede foi o autor (HOLSTEIN, 1959a; HOLSTEIN, 1959b), o hamiltoniano efetivo proposto por Holstein é dado pela expressão:

$$H = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2M} \hat{P}_n^2 + \frac{M\omega^2}{2} \hat{X}_n^2 + J(c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) + (\epsilon_n + A\hat{X}_n)c_n^\dagger c_n \right] \quad (1.29)$$

onde \hat{P}_n é o operador momento no sítio n , \hat{X}_n é o operador posição do elemento n da cadeia, J é a energia necessária para o elétron sair do sítio n e saltar (*hopping*) para os orbitais vizinhos $n + 1$ e $n - 1$, c_n^\dagger e c_n são os operadores de criação e aniquilação do elétron, ϵ_n são as energias iônicas em cada n , por fim, A é um parâmetro de acomplamento associado a energia eletrônica dos sítios da cadeia.

Considerando que o movimento de vibração de cada sítio da cadeia é tão lento que atinge a posição de equilíbrio em uma escala de tempo muito menor que o tempo de evolução do pacote de ondas eletrônico, podemos considerar que os íons da cadeia estão fixos, assim o termo cinético da equação 1.29 é nulo. Com isso estamos considerando que a interação elétron-fônon se dá de modo instantâneo, essa consideração é conhecida como aproximação adiabática. Todavia, se esta interação não for imediata, tem-se uma interação elétron-fônon não adiabática. Assumindo que os estados do sistema podem ser representados através de uma superposição das funções de onda de cada sítio, ou seja, $\psi(\vec{r}, x_1, \dots, x_N) = \sum_{n=1}^N a_n(x_1, \dots, x_N) \phi_n(\vec{r} - n\vec{a}, x_n)$, podemos resolver o hamiltoniano da equação 1.29. Vejamos,

$$\begin{aligned} H\psi &= \left[\frac{M\omega^2}{2} \sum_{n=1}^N \hat{X}_n^2 + J \sum_{n=1}^N (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) + \sum_{n=1}^N (\epsilon_n + A\hat{X}_n) c_n^\dagger c_n \right] \sum_m a_m \phi_m \\ &= \sum_m \left[\sum_n \left(\frac{M\omega^2}{2} x_n^2 \right) a_m + J(a_{m+1} + a_{m-1}) + Ax_m a_m \right] \phi_m. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Tomando o complexo conjugado $\psi^* = \sum_m a_m^* \phi_m^*$, temos que:

$$\begin{aligned} \int \psi^* H \psi d\vec{r} &= \sum_n \frac{M\omega^2}{2} x_n^2 \left(\sum_{mm'} a_m^* a_m \int \phi_m^* \phi_m d\vec{r} \right) + J \left(a_m^* (a_{m+1} + a_{m-1}) \int \phi_m^* \phi_m d\vec{r} \right) \\ &\quad + A \left(x_m a_m^* a_m \int \phi_m^* \phi_m d\vec{r} \right) \end{aligned} \quad (1.31)$$

Adotando nulas as integrais de sobreposição de orbitais (*overlap*) para todo $m \neq m'$ e considerando normalizadas as funções de onda moleculares e as funções de onda de estado, temos: $\int \phi_m^* \phi_m d\vec{r} = 1$ se $m = n$ e $\int \psi^* \psi d\vec{r} = 1 \rightarrow \sum_m |a_m|^2 = 1$. Podemos então escrever a equação 1.31 como:

$$H' = \sum_n \frac{M\omega^2}{2} x_n^2 + \sum_m [J a_m^* (a_{m+1} + a_{m-1}) + Ax_m |a_m|^2]. \quad (1.32)$$

Calculando os x_n que minimizam a energia H' , segue que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'}{\partial x_p} &= M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 + \sum_m \frac{\partial a_m^*}{\partial x_p} [Ax_m a_m + J(a_{m+1} + a_{m-1}) - \lambda a_m] \\ &\quad + \sum_m \frac{\partial a_m}{\partial x_p} [Ax_m a_m^* + J(a_{m+1} + a_{m-1}) - \lambda a_m]. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Utilizando a equação de Schrödinger independente do tempo ($H\psi = \varepsilon\psi$) podemos escrever:

$$\begin{aligned} \varepsilon a_m^* &= \sum_n \left(\frac{M\omega^2}{2} x_n^2 \right) a_m^{(*)} + J(a_{m+1}^{(*)} a_{m-1}^{(*)}) + Ax_m a_m^{(*)} \\ \left(\varepsilon - \sum_n \frac{M\omega^2}{2} x_n^2 \right) a_m^{(*)} &= J(a_{m+1}^{(*)} a_{m-1}^{(*)}) + Ax_m a_m^{(*)} \end{aligned} \quad (1.34)$$

Desta forma, podemos escrever a equação 1.33 como:

$$\frac{\partial H'}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 + \left(\varepsilon - \sum_n \frac{M\omega^2}{2} x_n^2 \right) \sum_m \left(\frac{\partial a_m^*}{\partial x_p} a_m + a_m^* \frac{\partial a_m}{\partial x_p} \right), \quad (1.35)$$

devido a normalização da função de onda, o último termo é nulo, assim, obtemos o seguinte Hamiltoniano:

$$\frac{\partial H'}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A|a_p|^2. \quad (1.36)$$

Uma vez que a minimização da energia H' exige que os valores de x_p devem ser tais que $\partial H'/\partial x_p$ sejam nulas, desta forma, podemos escrever que:

$$\begin{aligned} 0 &= M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 \\ x_p &= -\frac{A|a_p|^2}{M\omega^2}. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Substituindo esse resultado em 1.32, o Hamiltoniano H' fica:

$$H' = \sum_n \left[-\frac{A|a_p|^2}{M\omega^2} + J a_n^* (a_{n+1} + a_{n-1}) \right]. \quad (1.38)$$

Utilizando as relações canônicas $i\hbar\dot{a} = \frac{\partial H'}{\partial a_n^*}$ e $i\hbar\dot{a}^* = -\frac{\partial H'}{\partial a_n}$ podemos obter a equação de Schrödinger não-linear discreta, dada por:

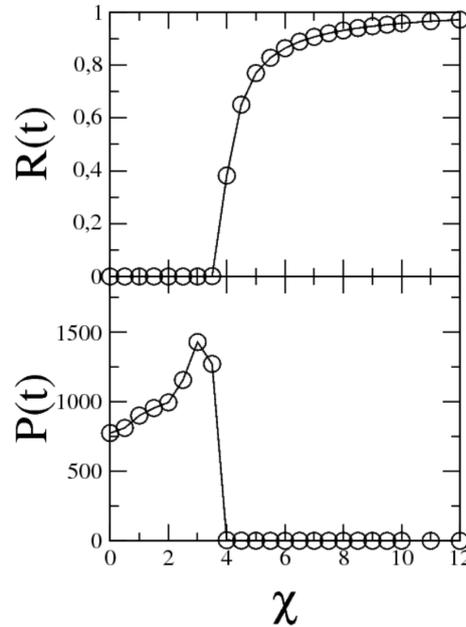
$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n(t) = J[a_{n+1}(t) + a_{n-1}(t)] - \chi_n |a_n(t)|^2 a_n(t). \quad (1.39)$$

onde $\chi = A^2/M\omega^2$ é o parâmetro que regula o grau de interação elétron-fônon. A 1.39 nos revela uma das principais características de sistema não-lineares discretos que é a capacidade de auto-armadilhar a função de onda, conhecido na literatura como *self-trapping*. Podemos encontrar esse tipo de aproximação adiabática em diversos trabalhos: (MOLINA; TSIRONIS, 1995; DATTA; KUNDU, 1996; DATTA; JAYANNAVAR, 1998a; MOURA; CAETANO; SANTOS, 2012; ZHANG; KANG; LI, 2017)

Resolvendo numericamente a equação 1.39 podemos exemplificar o fenômeno de auto-armadilhamento. Na figura 6 temos a probabilidade de encontrarmos o elétron no sítio inicial (quadro superior) e a função participação no limite assintótico (quadro inferior). Observa-se que após um determinado grau de acoplamento elétron-fônon χ a probabilidade de retorno no sítio inicial começa a aumentar, enquanto que, a função participação tende a zero. Isto significa que naquele ponto ($\chi \approx 3, 70$) temos o início de uma transição entre o regime em que a função é estendida e outro regime em que a função é localizada. Essa transição ocorre devido a interação entre a função de onda eletrônica com os modos vibracionais da rede, esta interação tem como consequência o fenômeno de auto-armadilhamento (*self-trapping*).

Outros modelos surgiram na tentativa de entender a interação elétron-fônon. Um desses trabalhos é o desenvolvido pelos autores (SU; SCHRIEFFER; HEEGER, 1979), conhecido como modelo SSH. Enquanto o Holstein investigou a dinâmica eletrônica sob ação de fônons ópticos, Su-Schrieffer-Heeger considerou em seu modelo a influência de fônons acústicos sobre a função de onda eletrônica. Nesse caso, o acoplamento do elétron com a rede se dá através do termo cinético, ou seja, através do termo de salto (*hopping*) entre os sítios vizinhos. Outro fator é o fato

Figura 6 – No painel superior temos a probabilidade de retorno $R(t_\infty)$ em um tempo longo em função de χ . Enquanto que no painel inferior temos a função participação $P(t_\infty)$ para cada valor de χ . Utilizamos um pacote de ondas tipo delta localizado inicialmente no centro de uma cadeia com $N = 1000$ sítios.



Fonte: Do autor, 2018.

dos estudos sobre o modelo de Holstein estarem centrados na obtenção de um Hamiltoniano efetivo, enquanto o modelo SSH é costumeiramente tratado como um sistema de duas equações acopladas. Onde uma equação representa a dinâmica da rede clássica e uma outra a dinâmica eletrônica. Dentro desta perspectiva, temos o surgimento de diversas investigações que utilizam o modelo SSH (VELARDE, 2010; NETO; MOURA, 2016).

2 Dinâmica de um elétron na presença de campo pulsado

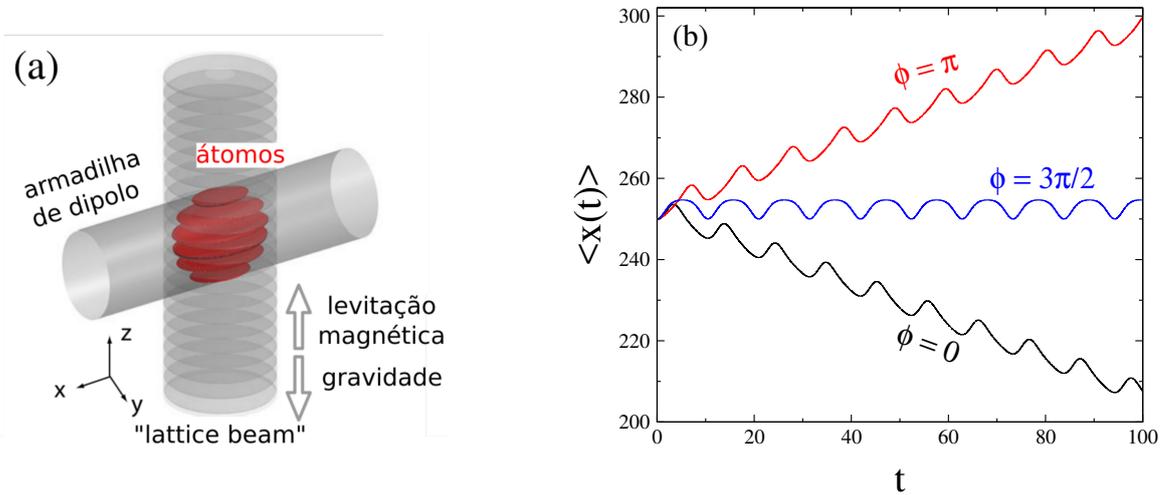
Como vimos no capítulo anterior, o campo externo tem uma influência muito forte na dinâmica de um elétron. Controlar o transporte de partículas quânticas através de campos de condução externos é um problema básico de grande interesse para a comunidade científica. Monitorizar dinamicamente a evolução do pacote de ondas carrega uma aplicabilidade gigantesca, como efetuar armazenamento de estados quânticos e transferência coerente de informação quântica (SONG; SUN, 2005).

Ao submetermos um pacote de ondas a um campo elétrico dependente do tempo a dinâmica eletrônica apresenta uma dependência direta com as características do campo externo aplicado. Como exemplo podemos citar o fenômeno das super oscilações de Bloch (HOLTHAUS, 1999; KUDO; MONTEIRO, 2011; CAETANO; LYRA, 2011b), que descreve um fenômeno de oscilações de grande amplitudes, que reproduz um certo tipo de comportamento do pacote de ondas em uma cadeia periódica sob ação de uma superposição de campos elétricos.

Em 2010 os autores (HALLER et al., 2010a) realizaram um experimento em condensado de Bose-Einstein onde conseguiram mostrar super-oscilações de Bloch e também o transporte unidirecional do pacote de ondas. O experimento consiste em um condensado de Bose-Einstein com $1,2 \times 10^5$ átomos de Césio (Cs) armadilhados por feixes cruzados carregados adiabaticamente dentro de 400 ms em uma rede óptica unidimensional verticalmente orientada. Com esta configuração (ver figura 7 (a)), os átomos são levitados contra a gravidade por meio de um gradiente de campo magnético de maneira que os átomos ficassem espalhados formando uma rede de aproximadamente 50 sítios. Os autores conseguem criar um campo utilizando artifícios do conjunto levitação magnética e gravidade que geram o efeito de uma superposição de campos dada pela expressão $F(t) = F_0 + \Delta F \sin(2\pi\nu t + \phi)$. Onde F_0 é uma força constante, ΔF é a amplitude de modulação, ν é a frequência de modulação e ϕ é a diferença de fase entre os campos.

Na figura 7 (b) temos a integração numérica da aceleração dependente do tempo [$a(t) = F_0/m + \Delta F/m \sin(2\pi(\nu_B + \Delta\nu)t + \phi)$]. Em (a) temos o caso ressonante, em que $\nu = \nu_B$, devido a essa condição o pacote de ondas realiza um movimento unidirecional. A direção de propagação é determinada pela diferença de fase ϕ . Observe que quando $\phi = 0$ temos um movimento unilateral para o lado direito da cadeia, enquanto que quando $\phi = \pi$ o pacote de ondas inverte sua direção de propagação. Isso acontece devido ao fato de que a velocidade de grupo apresentar uma dependência com o cosseno. Assim, para os casos em que $\phi = \pi/2$ e $3\pi/2$, o pacote de ondas realiza oscilações de Bloch.

Figura 7 – Em (a) Configuração experimental de uma cadeia de aproximadamente 50 átomos sob efeito de um campo externo formado pela superposição de uma força constante e uma dependente do tempo. Em (b) Posição média do pacote de ondas em uma cadeia com $N = 500$ sítios sob ação de um campo elétrico externo formado pela superposição de um campo constante e outro harmônico. Mostramos três curvas para direntes valores de ϕ .



Fonte: (a) Retirada da referência (HALLER et al., 2010a). Tradução e (b) Do autor, 2018.

Em 2011, os autores (CAETANO; LYRA, 2011a), visando compreender detalhadamente a dinâmica de uma partícula sob ação de dois campos, apresentaram um estudo numérico e uma análise analítica através da abordagem semi-clássica. O campo utilizado pelos autores é dado pela expressão (HALLER et al., 2010b; HOLTHAUS, 1999; KUDO; MONTEIRO, 2011):

$$F(t) = -e[F_0 + \Delta F \sin(\omega t + \phi)] \quad (2.1)$$

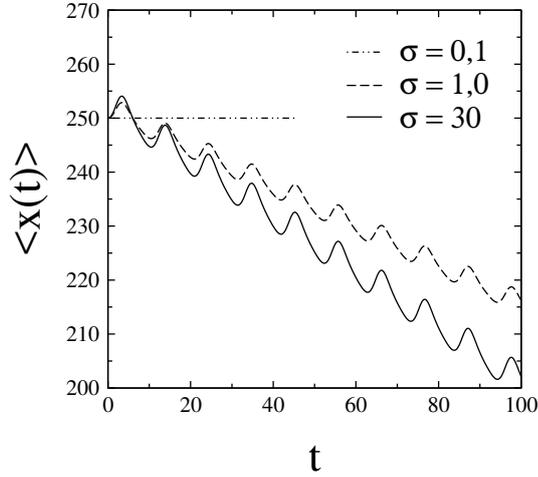
onde o parâmetro F_0 representa a intensidade do campo uniforme (DC - *Direct Current*), ΔF a amplitude de oscilação, ω a frequência de oscilação do campo alternado (AC - *alternating current*) e ϕ é o parâmetro de fase.

Em seus estudos, Caetano e Lyra investigaram a influência da condição inicial do pacote de ondas sobre a dinâmica eletrônica sob ação dos campos supracitados. Quando falamos em dinâmicas de partículas, a largura do pacote de ondas é um parâmetro importante a ser avaliado, pois, este possui influência direta no comportamento do elétron. Para pacotes de ondas com largura muito estreita ($\sigma_0 \approx 0$) o centroide não apresenta nenhum movimento (DOMÍNGUEZ-ADAME, 2010), ou seja, a posição média do pacote de onda permanece no sítio inicial n_0 . A medida em que aumentamos a largura inicial ($\sigma_0 \rightarrow \infty$) a dinâmica do pacote de onda passa a coincidir com a descrição semi-clássica (CAETANO; LYRA, 2011a).¹

Na figura 8, temos a evolução temporal da posição média $\langle x(t) \rangle = \sum_n n |\psi_n(t)|^2$, para diferentes larguras do pacote de onda conduzido pelo campo externo com parâmetros $F_0 = 0.6$,

¹ Para mais detalhes sobre a relação entre as condições iniciais do pacote de onda e a dinâmica do pacote de ondas, consultar o Apêndice A

Figura 8 – Evolução temporal do centroide para diferentes larguras do pacote de onda. Utilizamos uma rede com $N = 500$ sítios, $\sigma = 0, 1; 1, 0$ e 30 . Adotamos a seguinte configuração para o campo elétrico. $F_0 = 0, 6$, $\Delta F = 0, 8F_0$, $\phi = 0$ e $\omega = \omega_{\text{Bloch}}$.



Fonte: Do autor, 2018.

$\Delta F = 0.8F_0$ e $\phi = 0$. Ao assumirmos valores para $\sigma > 0$ o centroide do pacote de ondas apresenta um deslocamento linear unidirecional ao longo da rede. Isto se dá apenas quando a frequência do campo AC é considerada múltipla da frequência de oscilação do centróide do pacote de ondas, frequência de Bloch, acusada pelo campo DC (ω_{Bloch}). Outro fato interessante a ser observado é que a medida em que vamos aumentando a largura do pacote de ondas, sua velocidade de deslocamento também aumenta. Os autores mostram que para $\sigma \gg 0$ a dinâmica do elétron corrobora com a descrição semi-clássica desenvolvida no trabalho.

Dentro desse contexto de transferência de estados quânticos e controle coerente de onda de matéria através da aplicação de campos externos, propomos nesse capítulo uma ferramenta para controlar a dinâmica do elétron em uma cadeia unidimensional cristalina. Mostramos através de resultados numéricos e analíticos que com a simples utilização de um campo elétrico pulsado é possível manipular o comportamento do pacote de ondas eletrônico em uma cadeia 1D pura.

2.1 Modelo e Formalismo

Nosso modelo consiste em um sistema formado por N átomos idênticos distribuídos regularmente em uma cadeia unidimensional. Esta cadeia possui um único orbital n por sítio, de modo que os elétrons podem ocupar estes orbitais. Um elétron que ocupa um determinado orbital n possui uma energia ϵ_n , referente a energia potencial do sítio ocupado. Utilizando a aproximação de ligação forte (*tight-binding*), assumimos que existe uma pequena superposição (*overlap*) entre os orbitais, de modo que, a partícula só pode interagir com os orbitais dos primeiros vizinhos $n + 1$ ou $n - 1$.

O hamiltoniano que descreve o modelo apresentado é dado por

$$H_0 = -J \sum_n (|\psi_n\rangle\langle\psi_{n+1}| + |\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n|) + \sum_n \epsilon_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad (2.2)$$

onde $|\psi_n\rangle$ é um estado de Wannier localizado no sítio n , com energia potencial ϵ_n e J representa energia necessária para o elétron se deslocar entre os orbitais mais próximos $n + 1$ ou $n - 1$. Ao submetermos esse sistema a uma diferença de potencial, o Hamiltoniano da equação (2.2) é acrescido de um termo para representar a atuação desse campo elétrico externo, assim temos que

$$H = -J \sum_n (|\psi_n\rangle\langle\psi_{n+1}| + |\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n|) + \sum_n \epsilon_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| - \sum_n eE(t)\mathbf{n}a |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad (2.3)$$

onde e é a carga da partícula, $E(t)$ representa o campo elétrico aplicado paralelamente à cadeia, \mathbf{n} é o operador posição e a o espaçamento entre os sítios da cadeia.

Para realizarmos a evolução temporal desse sistema, vamos escrever as componentes do pacote de onda na representação de Wannier, que é dada por $|\Psi(t)\rangle = \sum_m \phi_m |\psi_m\rangle$ e governada pela equação de Schroedinger dependente do tempo. Aplicando o operador H da equação (2.3) em $|\Psi(t)\rangle$ temos que,

$$\begin{aligned} H|\Psi(t)\rangle &= \left[-J \sum_n (|\psi_n\rangle\langle\psi_{n+1}| + |\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n|) + \sum_n \epsilon_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \right] \left[\sum_m \phi_m |\psi_m\rangle \right] \quad (2.4) \\ &\quad - \sum_n eE(t)\mathbf{n}a |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \sum_m \phi_m |\psi_m\rangle \\ &= -J \sum_n (|\psi_n\rangle\langle\psi_{n+1}| + |\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n|) \sum_m \phi_m |\psi_m\rangle + \sum_n \epsilon_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \sum_m \phi_m |\psi_m\rangle \\ &\quad - \sum_{n,m} eE(t)\mathbf{n}a \phi_m |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_m\rangle \\ &= -J \left(\sum_{n,m} \phi_m |\psi_n\rangle\langle\psi_{n+1}|\psi_m\rangle + \phi_m |\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n|\psi_m\rangle \right) + \sum_{n,m} \epsilon_n \phi_m |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\phi_m\rangle \\ &\quad - \sum_{n,m} eE(t)\mathbf{n}a \phi_m |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_m\rangle \\ &= -J \left(\sum_{n,m} \phi_m |\psi_n\rangle\delta_{n+1,m} + \phi_m |\psi_n\rangle\delta_{n-1,m} \right) + \sum_{n,m} \phi_m [\epsilon_n - eE(t)\mathbf{n}a] |\phi_m\rangle\delta_{n,m} \end{aligned}$$

devido à propriedade da função delta, ao realizarmos a soma em n e m

$$H|\Psi(t)\rangle = -J(\phi_{n+1} + \phi_{n-1})|\psi_n\rangle + [\epsilon_n - eE(t)\mathbf{n}a]\phi_n|\psi_n\rangle. \quad (2.5)$$

Desta forma, encontramos a seguinte equação de Schrödinger:

$$i\dot{\phi}_n = -J(\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) + [\epsilon_n - eE(t)\mathbf{n}a]\phi_n \quad (2.6)$$

adotaremos uma unidade de energia de tal maneira que $J = e = a = \hbar = 1$ e expressaremos o tempo em unidades de \hbar/J .

Para resolvermos numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo [ver eq. (2.6)] utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Utilizamos um incremento de tempo $\delta t = 10^{-3}$ que se mostrou suficiente para a conservação da norma da função de onda ($1 - \sum_n |\phi_n(t)|^2 \leq 10^{-32}$) em todos os intervalos de tempo mostrados nos resultados deste capítulo. Consideramos que em $t = 0$ o pacote de onda tem a forma de uma gaussiana posicionada no centro da cadeia cristalina. Ou seja,

$$\phi_n(t = 0) = \frac{1}{A(\sigma)} \exp \left[\frac{-(n - n_0)^2}{4\sigma^2} \right] \quad (2.7)$$

onde $A(\sigma)$ é um fator de proporcionalidade, σ a largura da gaussiana e n_0 a posição central da mesma, $N/2$. Aplicamos um campo elétrico pulsado $E(t)$

$$E(t) = B(\rho) \exp \left[\frac{-(t - \tau)^2}{4\rho^2} \right] \quad (2.8)$$

onde ρ é a largura do campo elétrico gaussiano e controla a duração de cada pulso, τ é o tempo de referência em que cada pulso é aplicado e $B(\rho)$ é uma constante que modula a intensidade do campo.

Para caracterizar a dinâmica do nosso sistema utilizaremos algumas quantidades físicas típicas empregadas na literatura. A posição média do pacote de onda ou comumente conhecido como centroide

$$\langle x(t) \rangle = \sum_n n |\psi_n(t)|^2, \quad (2.9)$$

o deslocamento médio quadrático

$$\xi(t) = \sqrt{\sum_n (n - \langle x(t) \rangle)^2 |\psi_n(t)|^2}, \quad (2.10)$$

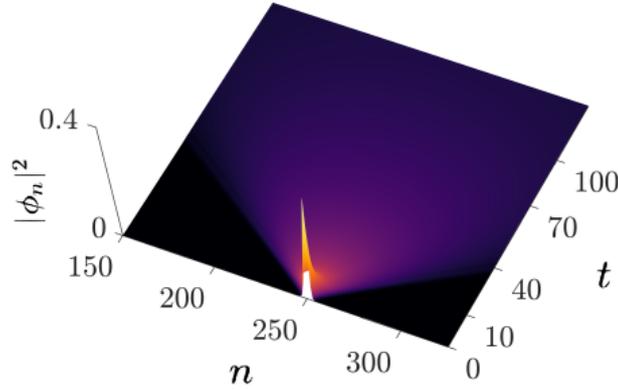
e a probabilidade de retorno de encontrarmos o elétron na posição inicial, que pode ser escrita como $n_0 = N/2$

$$R(t) = |\phi_{n_0}(t)|^2. \quad (2.11)$$

2.2 Resultados

Para uma melhor compreensão do papel desempenhado pelo campo elétrico pulsado sobre a dinâmica do pacote de ondas eletrônico, iniciaremos nossos resultados apresentando a forma como um pacote de ondas inicialmente gaussiano se estende pela cadeia cristalina na ausência de campo elétrico, isto é, $E(t) = 0$. Na figura 9 temos o perfil da evolução temporal da densidade de probabilidade de uma função gaussiana centrada no centro da cadeia cristalina de $N = 500$ sítios. Como todos os sítios da cadeia possuem a mesma energia potencial, observa-se como resultado o pacote de ondas se espalhando por toda a rede, corroborando com o modelo

Figura 9 – Evolução temporal do pacote de onda em uma rede cristalina com $N = 500$ sítios. Consideramos inicialmente uma função de onda do tipo gaussiana de largura $\sigma = 1$ e centrada o sítio $n_0 = N/2$. Não há campo elétrico aplicado sob o sistema, $E(t) = 0$.



Fonte: Do autor, 2018.

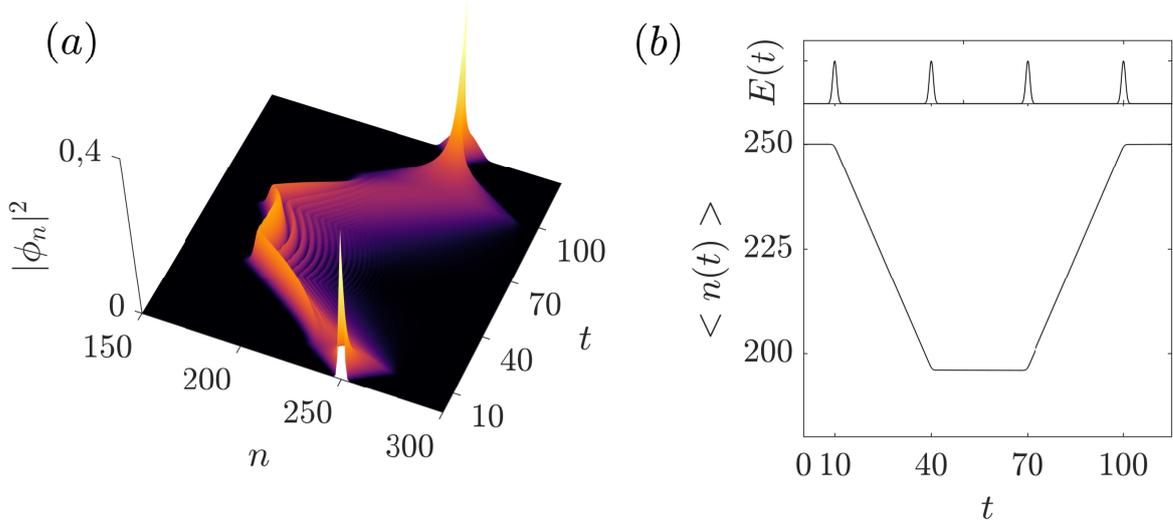
de Bloch apresentado no capítulo anterior. Podemos através da figura 9 a medida que o tempo evolui o pacote de ondas se propaga alargando-se e diminuindo sua amplitude.

A figura 10 (a) nos mostra o perfil da evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda $|\phi_n|^2$ em função de t e n . Em nossos cálculos utilizamos uma cadeia unidimensional com $N = 500$ sítios. Como condição inicial temos um pacote de onda gaussiano de largura $\sigma = 1$ e centrado em $n_0 = N/2$. Neste primeiro experimento ligamos o campo elétrico pulsado em quatro instantes de tempo $\tau = 10, 40, 70, 100$ unidades de tempo [vamos representar unidades de tempo como: (u.t.)], cada pulso com uma duração de $\rho = 0.886$ (u.t.). A constante de normalização $B(\rho)$ foi ajustada de modo que ao integrarmos a equação (2.8) resultasse em um impulso de valor $I = \int_{-\infty}^{\infty} E(t)dt = \pi/2$.

Nos tempos iniciais $t < 10$ (u.t.), onde o campo elétrico encontra-se desligado $E(t) = 0$, o pacote de onda evolui sem nenhuma interação. No entanto, ao aplicarmos o primeiro pulso, o pacote de ondas é empurrado em uma direção preferencial caracterizando um movimento unidirecional. Ao aplicarmos o segundo pulso em $t = 40$ (u.t.) o pacote de ondas é desacelerado instantaneamente, de modo que sua velocidade de grupo é aproximadamente zero, ou seja, $\vec{v}_g \approx 0$. Após ligarmos o terceiro pulso em $t = 70$ (u.t.), o pacote de ondas apresenta um comportamento não intuitivo. O elétron reinicia seu movimento unidirecional, porém na orientação oposta. Em $t = 100$ (u.t.), ligamos o quarto pulso e a partícula responde novamente cessando seu movimento.

Este comportamento pode ser entendido através do formalismo semi-clássico. Para uma partícula de carga e sujeita a ação de um campo externo dependente do tempo, podemos utilizar

Figura 10 – Evolução temporal do pacote de onda em uma rede cristalina com $N = 500$ sítios conduzido por um campo elétrico pulsado. Consideramos uma função de onda do tipo gaussiana de largura $\sigma = 1$ e centrada no sítio $n_0 = N/2$. Ligamos o campo em quatro instantes de tempo, $\tau = 10, 40, 70, 100$. Em (a) evolução da densidade de probabilidade $|\phi_n|^2$, (b) temos a dinâmica da posição média do pacote de onda a cada pulso elétrico aplicado.



Fonte: Do autor, 2018.

o teorema da aceleração e escrever o vetor de onda \vec{k} como

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \frac{e}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E(t) dt \quad (2.12)$$

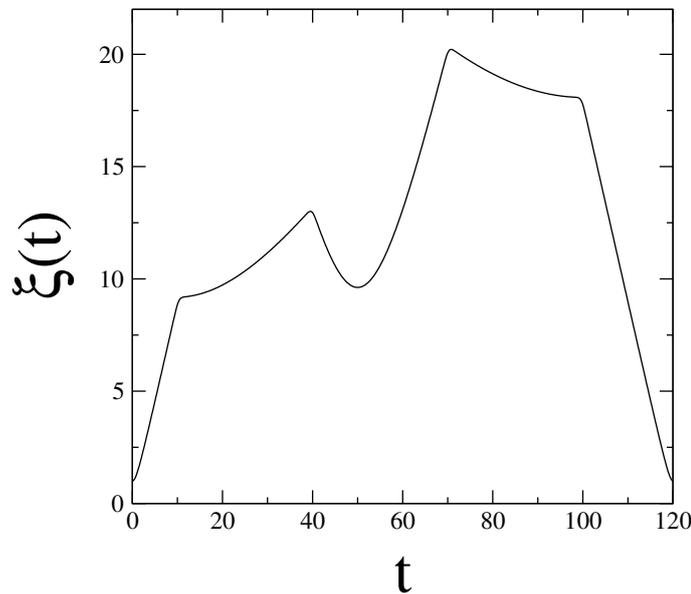
sendo a relação de dispersão do sistema expressa por $\varepsilon(\vec{k}) = 2J \cos(ka) + \epsilon$, a velocidade de grupo do pacote de onda é:

$$\begin{aligned} \vec{v}(\vec{k}') &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} (2J \cos(ka) + \epsilon) \\ &= -\frac{2Ja}{\hbar} \sin\left(\vec{k}_0 a + \frac{ea}{\hbar} I\right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

como $e = a = \hbar = 1$, $k_0 = 0$, a velocidade de grupo depende unicamente do campo aplicado.

Através da equação (2.13) podemos entender o efeito que o campo elétrico pulsado causa sobre o transporte eletrônico. Ao ligarmos o pulso em $t = 10$ (u.t.), o pacote de onda muda seu vetor de onda inicial de $k = 0$ para $k = \pi/2$ implicando assim em uma mudança da velocidade de grupo, com podemos ver na figura 10 (b). A posição média da partícula permanece constante

Figura 11 – Deslocamento quadrático médio para uma cadeia cristalina com $N = 500$ sítios. Ligamos campo pulsado em quatro instantes de tempo, $\tau = 10, 40, 70, 100$.



Fonte: Do autor, 2018.

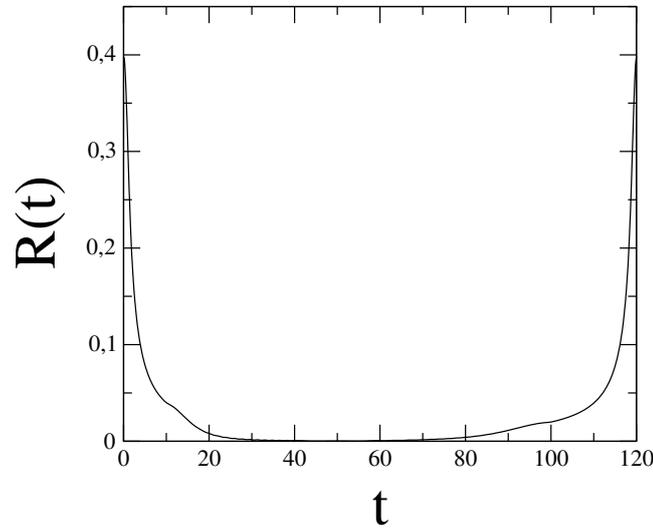
até o momento em que há a aplicação do primeiro pulso elétrico. Em $t > 10$ (u.t.), o centroide realiza um deslocamento unidirecional a velocidade constante até o instante em que o campo elétrico pulsado é ligado novamente $t = 40$ (u.t.). Nesse instante o vetor de onda muda de $k = \pi/2$ para $k = \pi$ e a velocidade de grupo da partícula é nula, como podemos ver na figura 10 (b). A posição média do elétron passa a ser constante após transladar aproximadamente 60 sítios.

A mudança de orientação após a aplicação do terceiro pulso elétrico, discutida anteriormente, está relacionada ao fato de que o vetor de onda da partícula em $t = 70$ (u.t.) passa a ser $k = 3\pi/2$, de modo que, temos agora $-\vec{v}_g$. Na aplicação do quarto pulso, o vetor de onda muda para $k = 2\pi$ e a posição média do pacote de ondas volta a ser constante no tempo.

Na figura 11 temos a representação do deslocamento quadrático médio em função do tempo. Vemos que para $t < 10$ (u.t.) o pacote de ondas alarga ao longo da cadeia cristalina, $\xi(t)$ crescente. Após a aplicação do primeiro pulso em $t = 10$ (u.t.), vemos um enfraquecimento na dispersão. Neste momento o pacote de ondas é comprimido e "empurrado" em uma direção preferencial ao longo da cadeia. Na aplicação do segundo pulso, em que a posição média do elétron se torna constante, o deslocamento quadrático médio mostra um pequeno decaimento e, após alguns instantes de tempo volta a se alargar. Em $t = 70$ (u.t.) a partícula inverte seu sentido de translação ao longo da cadeia. Neste momento o pacote de onda eletrônico começar sofre interferência e isso faz com que haja essa diminuição da largura, $\xi(t)$ decaindo.

Para consolidar ainda mais nossos resultados, apresentamos na figura (12) a probabilidade de retorno, definida por $R(t) = |\psi_{n_0}(t)|^2$, onde n_0 é a posição inicial do elétron, colocado no centro da cadeia $N/2$. Podemos entender a probabilidade de retorno como sendo a probabilidade

Figura 12 – Probabilidade de retorno obtida do Hamiltoniano de ligação apertada (*tight-binding*) de um elétron, em uma cadeia cristalina pura com $N = 500$ sítios sob a influência de um campo elétrico pulsado, aplicado em $\tau = 10, 40, 70, 100$.



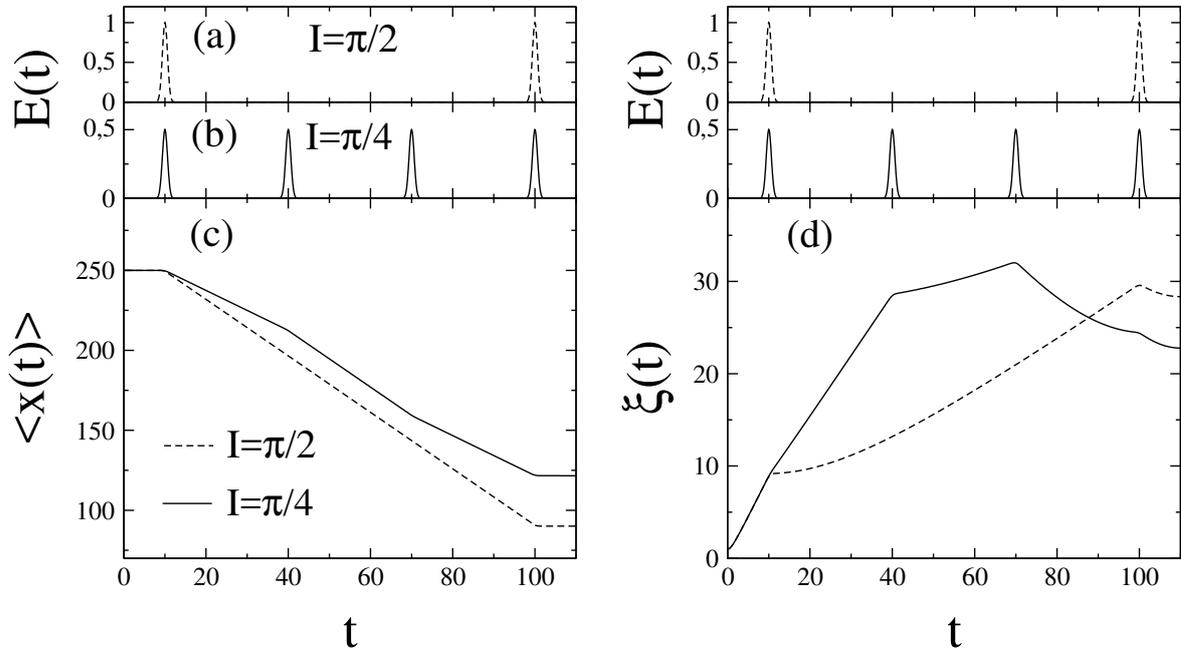
Fonte: Do autor, 2018.

de encontrarmos o elétron no sítio n_0 após um determinado período de tempo. Para o caso cristalino puro e com ausência de campo externo $E(t) = 0$, temos que a máxima probabilidade de retorno no sítio inicial é em $t = 0$. Uma vez que, de acordo com o modelo de Bloch, a função de onda eletrônica se estende por toda rede, ou seja, $t \rightarrow \infty \implies R(t) \rightarrow 0$. Observamos que em $t > 0$ a probabilidade de encontrarmos o elétron no sítio inicial tende rapidamente para zero. Após aplicarmos uma sequência de quatro pulsos, sendo o último aplicado em $t = 100$ (u.t.), observa-se que a probabilidade de retorno volta a crescer. É interessante notar que apesar do pulso ter sido aplicado em $t = 100$ (u.t.) a probabilidade de retorno alcança seu ponto inicial apenas em $t = 120$ (u.t) isso acontece devido a geometria do pacote de ondas.

Para esclarecer melhor a relação existente entre a descrição da mecânica quântica e a abordagem semi-clássica, construímos a figura (13) onde apresentamos a posição média e o deslocamento quadrático médio para dois experimentos distintos. O primeiro em fig. 13 (a) consiste em uma sequência de dois pulsos cada um com intensidade $I = \pi/2$ aplicados em $\tau = 10$ e $\tau = 100$. Enquanto que, o segundo experimento em fig. 13 (b) é constituído de uma sequência de quatro pulsos com intensidade $I = \pi/4$.

Ao analisar o centroide mostrado na figura 13 (c), observamos que do ponto de vista qualitativo existe uma grande semelhança entre os dois experimentos. No entanto, do ponto de vista quantitativo, vemos que no caso com $I = \pi/2$ (linha-tracejada) promove uma mudança maior na velocidade de grupo do pacote de ondas. Através da equação (2.13) é possível observar que quando $I = \pi/2$ o elétron alcança sua velocidade máxima e ao aplicarmos um segundo pulso elétrico o pacote de ondas atinge a velocidade nula $\vec{v}_g = 0$. Para o caso com campo $I = \pi/4$ (linha contínua) precisamos aplicar quatro pulsos para que a velocidade de grupo do elétron

Figura 13 – Cálculo numérico do centroide e do deslocamento médio quadrático. Para a simulação, consideramos dois valores de impulsos distintos. Em (a) temos o perfil do campo elétrico pulsado com uma intensidade equivalente a $I = \pi/2$ e em (b) com intensidade $I = \pi/4$. Em (c) temos os resultados para $I = \pi/2$ representado pela curva tracejada e $I = \pi/4$ pela curva contínua. Os cálculos foram feitos para um pacote de onda com $\sigma = 1.0$ numa cadeia unidimensional com $N = 500$ sítios.



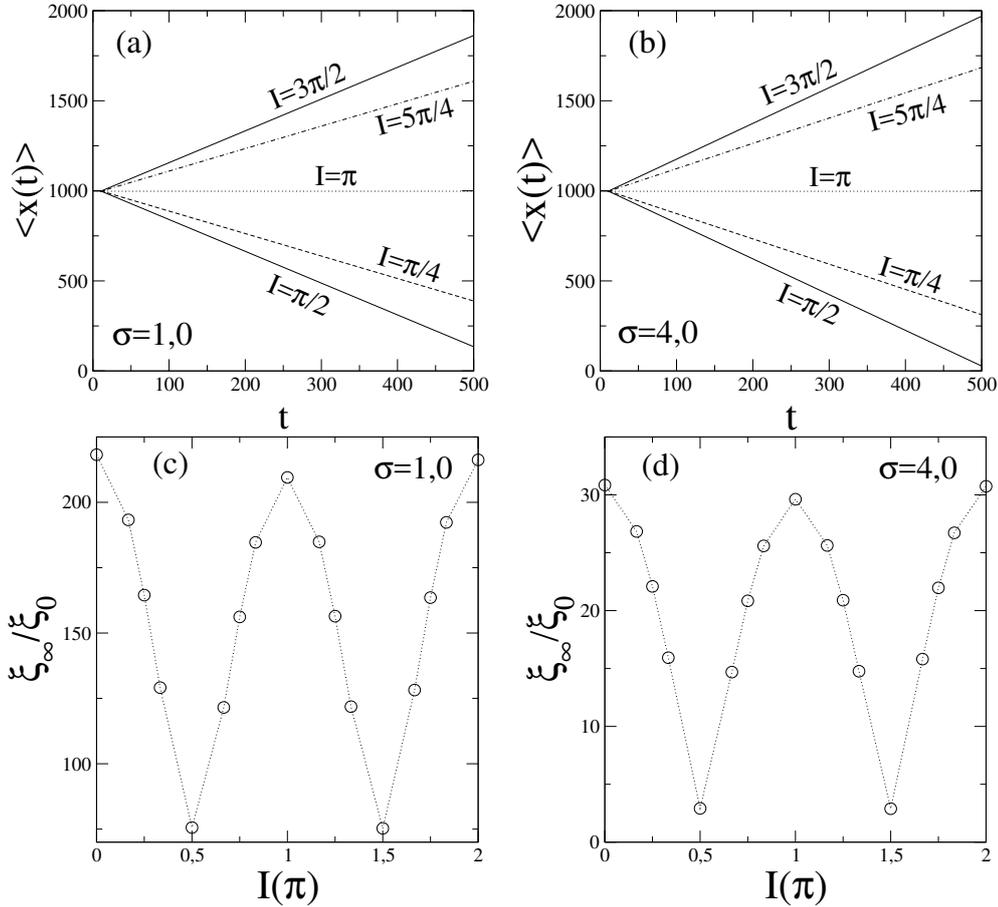
Fonte: Do autor, 2018.

seja nula, ou seja, $I_{resultante} = \sum_{i=1}^4 I_{\pi/4} = \pi$. O que corrobora ainda mais com a descrição semi-clássica. Na figura 13 (d), encontra-se o deslocamento quadrático médio ($\xi(t)$) para os mesmos experimentos. Observamos que para o campo elétrico pulsado com uma intensidade maior ($I = \pi/2$) há um enfraquecimento maior no alargamento do pacote de ondas. A aplicação de pulsos elétricos apresenta-se como uma proposta interessante para o controle tanto da direção e velocidade de propagação da partícula, como também da largura do pacote de ondas.

Visto anteriormente qual a influência da intensidade do campo elétrico pulsado sobre a dinâmica do pacote de onda eletrônico, vamos agora analisar o sistema do ponto de vista da largura inicial do pacote de ondas gaussiano, quais as mudanças causadas no comportamento do elétron alterando este parâmetro. Na figura 14 mostramos mais dois experimentos distintos, em (a) e (c) para $\sigma = 1,0$ e em (b), (d) com $\sigma = 4,0$. Utilizamos uma cadeia com $N = 2000$ sítios sob a ação de um único campo elétrico pulsado aplicado em $\tau = 10$ (u.t.) para vários valores de impulso $I = \pi/2, \pi/4, \pi, 5\pi/4$ e $3\pi/2$.

Observamos que ao ligarmos o campo pulsado com impulso I o pacote de onda passa a se deslocar unidirecionalmente. A direção de propagação e a velocidade média deste movimento são controladas pela intensidade do campo elétrico pulsado, como pode ser visto através da figura 14 (a-b), onde temos a posição média da partícula em função do tempo. Os dois pacotes

Figura 14 – Centroide em função do tempo para um pacote de ondas gaussiano com largura em (a) $\sigma = 1,0$ e (b) $\sigma = 4,0$ em uma cadeia cristalina pura com $N = 2000$ sítios, sob a influência de apenas um pulso elétrico aplicado em $\tau = 10$ (u.t.), alteramos apenas a intensidade do campo em $I = \pi/2, \pi/4, \pi, 5\pi/4$ e $3\pi/2$. Em (c) e (d) temos a proporção do deslocamento quadrático médio para um tempo longo em razão do deslocamento quadrático médio inicial, ξ_∞/ξ_0 . Em (c) $\sigma = 1,0$ e (d) $\sigma = 4,0$.



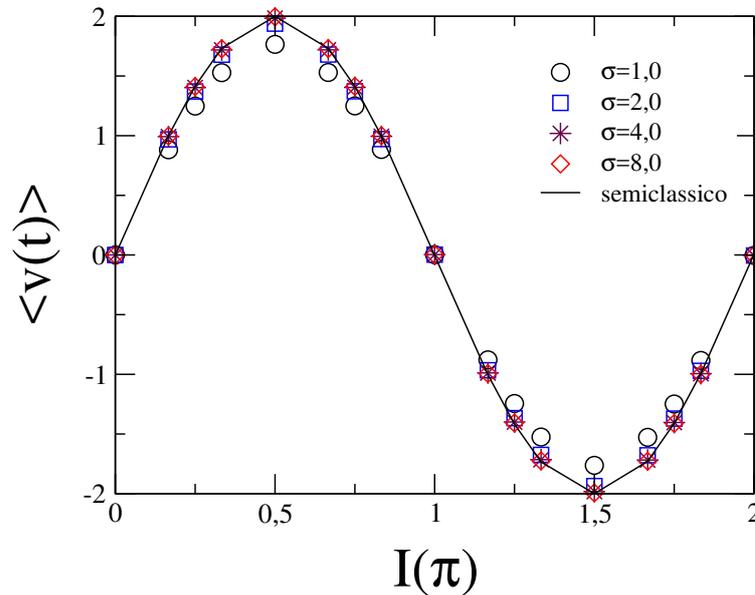
Fonte: Do autor, 2018.

de ondas com largura $\sigma = 1,0$ e $4,0$ apresentam o mesmo comportamento em relação o sentido de propagação, no entanto, vemos que o pacote de ondas com largura $\sigma = 4,0$ apresenta uma velocidade de grupo maior (figura 14 (b)), o que nos mostra bons acordos com a descrição semi-clássica (equação (2.13)).

Em 14 (c) e (d) temos a representação da razão entre o deslocamento quadrático médio em um tempo longo $t \rightarrow \infty$ e o deslocamento quadrático médio inicial em $t \approx 0$, ou seja, ξ_∞/ξ_0 , em função do impulso aplicado $I(\pi)$. É importante deixar claro que como estamos trabalhando com tempos longos ($t \rightarrow \infty$) e não estamos utilizando condições de periódicas de contorno, então desprezamos todos os efeitos de borda em nossas análises. Para o caso em que $\sigma = 4,0$ vemos que o pacote de ondas se espalha menos que o caso com $\sigma = 1,0$ e quando o campo pulsado tem intensidade $I = \pi/2$ e $I = 3\pi/2$ não há espalhamento, ou seja, $\xi_\infty \approx \xi_0$.

Na figura 15 mostramos a velocidade de grupo do pacote de ondas para cada valor da

Figura 15 – Velocidade de grupo média em função de cada impulso aplicado. Variamos a largura inicial do pacote de ondas gaussiano em $\sigma = 1,0$ até $\sigma = 8,0$.



Fonte: Do autor, 2018.

intensidade do impulso I para vários valores de largura do pacote de ondas gaussiano (σ). Vemos que a medida que vamos aumentando o valor de σ mais mais próximo ao resultado obtido via abordagem semi-clássica (linha contínua). O comportamento senoidal da velocidade corrobora com a equação (2.13).

2.3 Conclusões

Tratamos nesse capítulo um sistema de um elétron em uma cadeia pura unidimensional sob a ação de um campo elétrico pulsado. Nesse sistema dispomos uma função de onda inicialmente gaussiana no centro da cadeia e aplicamos pulsos elétricos em alguns instantes de tempo durante a evolução do pacote de ondas. Resolvemos numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem e calculamos algumas quantidades típicas para caracterizar a dinâmica eletrônica.

Nossos cálculos sugerem que o campo elétrico pulsado promove um novo tipo de dinâmica eletrônica ao longo da cadeia. Mostramos que ajustando a intensidade do campo elétrico pulsado temos a possibilidade de conduzir o elétron ao longo de uma cadeia unidimensional (para diferentes tamanhos) com diferentes velocidades, inverter o sentido de propagação como também a possibilidade de parar esse movimento por curtos intervalos de tempo aplicando um campo pulsado com intensidade $I = \pi$. Além dos resultados numéricos, apresentamos uma relação detalhada de tais resultados com a descrição semi-clássica.

Enfatizamos que nossos resultados apresenta-se como uma alternativa interessante no

contexto de manipulação de partículas carregadas em sistemas de baixa dimensionalidade. Este trabalho foi publicado na revista *Solid State Communications* no ano de 2016 (ver anexo A).

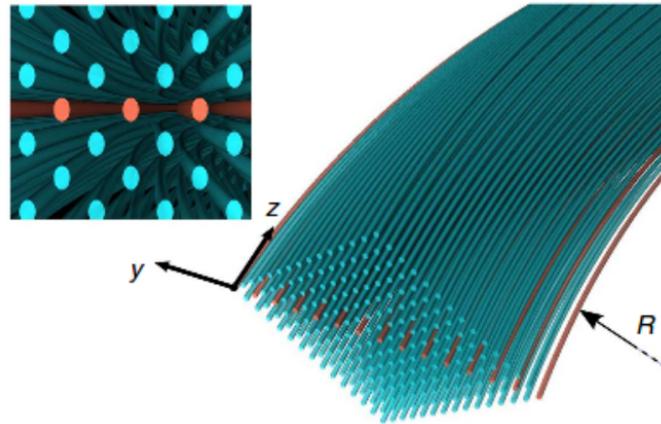
3 Caminhada quântica unidirecional de duas partículas correlacionadas

Entender o comportamento dinâmico de partículas quânticas interagentes se faz um pré-requisito importante para estudos experimentais de matéria quântica fortemente correlacionada como também para a implementação de processamento em informação quântica de alta fidelidade. Na presença de campo elétrico estático verificou-se que duas partículas quando correlacionadas através da interação de Hubbard apresentam oscilações coerentes com o dobro da frequência das oscilações de Bloch, ou seja, ω é proporcional ao dobro da intensidade do campo elétrico aplicado. (DIAS et al., 2007a; DIAS; LYRA; MOURA, 2010b; LONGHI; VALLE, 2012a; PEIXOTO et al., 2014).

A observação experimental de oscilações de Bloch para dois elétrons correlacionados em uma rede periódica 1d foi proposta em um análogo óptico pelo autor (LONGHI, 2011). O autor mostrou que é possível realizar o mapeamento através do transporte de luz espacialmente modulada em uma rede quadrada de guia de ondas com o eixo diagonal ($x = y$) possuindo um valor diferente de todos os outros guias, de modo que representa a energia do sítio (ver uma representação na figura 16). Esse trabalho impulsionou a primeira observação experimental do dobramento da frequência de oscilação induzido pela interação entre partículas. Os autores (CORRIELLI et al., 2013), utilizaram uma rede fotônica como um sistema de hamiltoniano estendido de Bose-Hubbard de duas partículas. Uma vez que o experimento de partícula única em uma rede quadrada apresenta características típicas de um sistema de duas partículas em 1d, os autores aproveitaram-se deste fato para simular uma rede quadrada 2d projetada por guias de onda ópticos acoplados de forma evanescente e adicionaram efeito entre as partículas através da fabricação de guias de ondas com índice de refração diferente e o efeito de campo elétrico constante simulado através da pequena curvatura nas guias, como pode ser visto através da figura 16. As guias de ondas possuem cores diferentes para indicar a diferença entre os índices de refração. O fenômeno também foi observado através de experimentos realizados em átomos ultrafrios de Rubídio (^{87}Rb) pelos autores (PREISS et al., 2015)

Quando submetemos partículas interagentes a campos externos dependentes do tempo, a dinâmica do sistema depende diretamente das peculiaridades destes campos. Caminhada quântica unidirecional pode ser induzida quando as partículas são conduzidas por uma superposição de campos estáticos e harmônicos (THOMMEN; GARREAU; ZEHNLE, 2002; IVANOV et al., 2008; LONGHI; VALLE, 2012b; DIAS; De Moura; LYRA, 2016). Em (DIAS; De Moura; LYRA, 2016) os autores estudam a dinâmica de duas partículas inicialmente interagente que evoluem em uma rede discreta unidimensional. Os autores apresentam a possibilidade de controle coerente dos estados de duas partículas emaranhadas. É possível controlar o sentido de propagação das

Figura 16 – Esquema de uma rede quadrada de guia de ondas com uma diagonal formada por guias de ondas com índice de refração diferente das demais, simulando o Hamiltoniano de Hubbard para dois elétrons de spins opostos.



Fonte: Retirada da referência (CORRIELLI et al., 2013).

duas partículas ajustando a fase do campo harmônico, como também a velocidade de propagação dos pacotes de ondas.

Caminhadas quânticas tem sido amplamente estudadas em uma variedade de plataformas diferentes como no desenvolvimento de algoritmos quânticos (CHAKRABORTY et al., 2016; PORTUGAL, 2013), filmes ferromagnéticos (EZAWA, 2011), transferência de energia em proteínas complexas (MOHSENI et al., 2008), redes de guias de ondas (PERETS et al., 2008; PERUZZO et al., 2010), partículas interagentes (WANG; LI, 2016) entre outros sistemas. Experimentalmente temos a realização de caminhadas quânticas para íons aprisionados (SCHMITZ et al., 2009). Dividindo-se em duas classes, a evolução das caminhadas quânticas é determinada completamente por uma evolução temporal unitária em ambas as classes. Para caminhadas quânticas discretas temos que a partícula se propaga em passos discretos determinados por uma moeda quântica. Enquanto que, para caminhadas quânticas contínuas no tempo, a dinâmica é descrita por um hamiltoniano independente do tempo (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993; FARHI; GUTMANN, 1998).

Tendo em mente os trabalhos teóricos e experimentais mostrando possibilidades de utilizar campos externos para manipular estados de partículas emaranhadas, propomos um novo protocolo para manipular estados de duas partículas correlacionadas em uma rede pura unidimensional (1d). Mostramos a possibilidade de realizar caminhadas quânticas contínuas no tempo sob o efeito de um campo elétrico pulsado dependente do tempo.

3.1 Modelo e Formalismo

Nosso modelo consiste em N átomos idênticos distribuídos regularmente de modo que formam uma cadeia unidimensional. Cada íon possui um único orbital, e cada orbital pode ser ocupado com até dois elétrons. Quando localizados nos mesmo sítio existe uma energia de interação U entre os mesmos. O hamiltoniano que rege o sistema é dado por:

$$H = \sum_n \sum_{s=1,2} J(c_{n+1,s}^\dagger c_{n,s} + c_{n,s}^\dagger c_{n+1,s}) + \sum_n \sum_{s=1,2} [\epsilon_n - eE(t)a\mathbf{n}] c_{n,s}^\dagger c_{n,s} + \sum_n U c_{n,1}^\dagger c_{n,1} c_{n,2}^\dagger c_{n,2} \quad (3.1)$$

onde $c_{n,s}$ e $c_{n,s}^\dagger$ são os operadores de aniquilação e criação para uma partícula de carga $-e$ no sítio n com *spin* s , J é a energia necessária para que os elétrons saltem (*hopping*) para os orbitais de primeiros vizinhos $n + 1$ e $n - 1$, ϵ_n é a energia potencial iônica de cada sítio n . Nesse capítulo, o termo que representará o campo elétrico externo é $E(t)$, \mathbf{n} é o operador posição, de modo que a força que agirá sobre a partícula de carga $-e$ será dada por $-eE(t)$. O último termo U do Hamiltoniano (3.1) refere-se a energia de interação de Hubbard quando os dois elétrons encontram-se no mesmo sítio (*on-site*).

Seguindo a metodologia existente na literatura onde leva-se em consideração que os dois elétrons são distinguíveis pelo spin (BRITO; RODRIGUES; NAZARENO, 2006; BRITO; RODRIGUES; NAZARENO, 2007; DIAS et al., 2007b; DIAS; LYRA; MOURA, 2010a), podemos escrever a função de onda como:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2). \quad (3.2)$$

Como nosso sistema é constituído por uma rede unidimensional de N sítios e dois elétrons, temos que nosso subespaço, onde avaliaremos os auto-estados do Hamiltoniano, será expandido em N^2 funções de onda. Enquanto que para um elétron em uma cadeia 1D na ausência de campo externo a função participação escala com $P(t) \propto t$, para dois elétrons a função participação quando $U = 0$ a função participação escala com $P(t) \propto t^2$.

$$|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_1, s_1} \sum_{n_2, s_2} \phi_{n_1, s_1, n_2, s_2} |\psi(n_{1s_1}, n_{2s_2})\rangle \quad (3.3)$$

$$|\psi(n_{1s_1}, n_{2s_2})\rangle = c_{n_1, \uparrow}^\dagger c_{n_2, \downarrow}^\dagger |0, 0\rangle \quad (3.4)$$

sendo $|0, 0\rangle$ é o estado de vácuo. Adotamos n_1 como sendo o sítio de ocupação do elétron 1 e n_2 o sítio ocupado pelo elétron 2.

Com base nestas considerações, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo para estudarmos os aspectos estacionários dos dois elétrons interagentes,

$$H|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \varepsilon|\Psi(n_1, n_2)\rangle. \quad (3.5)$$

Para simplificar nossos cálculos, separamos o Hamiltoniano da equação (3.1) em três partes: H_I , H_{II} e H_{III} . Para chegarmos a uma relação de recorrência vamos considerar algumas condições iniciais. Estando inicialmente os dois elétrons ocupando o mesmo sítio, $n_1 = n_2$, segue que

$$\begin{aligned}
 H|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \underbrace{J \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} (c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma})}_{H_I} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
 &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{\sigma} (\epsilon_n - eE(t)\mathbf{n}) c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}}_{H_{II}} |\Psi(n_1, n_2)\rangle \\
 &+ \underbrace{\sum_{n=1}^N U c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}}_{H_{III}} |\Psi(n_1, n_2)\rangle. \tag{3.6}
 \end{aligned}$$

Resolvendo a parte H_I temos:

$$\begin{aligned}
 H_I|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
 &+ c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) c_{n_{1\uparrow}}^\dagger c_{n_{2\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle, \tag{3.7}
 \end{aligned}$$

devido a atuação dos operadores de criação e aniquilação em férmions,

$$\begin{aligned}
 H_I|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
 &+ c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}\rangle \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_I|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow}\rangle \\
 &+ |n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow}\rangle) \tag{3.9}
 \end{aligned}$$

ou ainda, reescrevendo (3.9) como,

$$\begin{aligned}
 H_I|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_{\downarrow})\rangle \\
 &+ |\psi(n_1 - 1_{\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_{\downarrow})\rangle). \tag{3.10}
 \end{aligned}$$

Resolvendo a parte H_{II} da equação (3.6) temos:

$$\begin{aligned}
H_{II}|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (\epsilon_n - eE(t)(c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |\Psi(n_1, n_2)\rangle) \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (\epsilon_n - eE(t)(c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_{1,\uparrow}, n_{1,\downarrow}\rangle) \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\epsilon_{n_1} - eE(t)n_1 + \epsilon_{n_1} - eE(t)n_1) |n_{1,\uparrow}, n_{1,\downarrow}\rangle) \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} 2[\epsilon_{n_1} - eE(t)n_1] |\Psi_{n_{1,\uparrow}, n_{1,\downarrow}}\rangle). \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Calculando a parte H_{III} da equação (3.6) temos:

$$H_{III}|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N U c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} |\Psi(n_1, n_2)\rangle. \tag{3.12}$$

Como a interação ocorre apenas quando os elétrons estiverem no mesmo sítio (*on-site*), se $n_1 = n_2$ podemos escrever a equação (3.12) como:

$$H_{III}|\Psi(n_1, n_2)\rangle = \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} U |\Psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle. \tag{3.13}$$

Após encontrarmos as equações (3.10), (3.11), (3.13), reescrevemos a equação de Schrödinger (3.5)

$$\begin{aligned}
\varepsilon |\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [J(|\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_{1\downarrow})\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_{1\downarrow})\rangle) \\
&\quad + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 - 1_\downarrow)\rangle) + (2\epsilon_{n_1} - eE(t)n_1 + U)|\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle] \tag{3.14}
\end{aligned}$$

Calculando agora para o caso em que os elétrons não estão mais no mesmo sítio e sim, em $n_2 = n_1 + 1$. Assim, para H_I temos:

$$\begin{aligned}
H_I|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
&\quad + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) c_{n_{1,\uparrow}}^\dagger c_{n_{1,\downarrow}}^\dagger |0, 0\rangle \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \\
&\quad + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) |n_{1,\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle \\
&\quad + |n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow\rangle + |n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}\rangle) \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow)\rangle \\
&\quad + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle). \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Para H_{II} temos:

$$\begin{aligned}
H_{II}|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (\epsilon_n - eE(t)\mathbf{n})(c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1} - 2eE(t)(2n_1 + 1)] |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Em H_{III} temos a existência do termo de interação *on-site* de Hubbard, de modo que para elétrons em sítios diferentes $H_{III} = 0$. Desta forma, a equação de Schroedinger para $n_2 = n_1 + 1$ depende apenas de H_I e H_{II} , ou seja,

$$\begin{aligned}
\varepsilon|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [J(|\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow)\rangle) \\
&\quad + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 1_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow})\rangle) + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1})|\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle]
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Tomando $n_2 = n_1 + 2$, para H_I temos:

$$\begin{aligned}
H_I|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N (c_{n+1,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n+1,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} + c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n+1,\uparrow} \\
&\quad + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n+1,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow\rangle \\
&\quad + |n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow\rangle + |n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow\rangle) \\
&= J \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (|\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow)\rangle \\
&\quad + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle)
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Já para H_{II} temos

$$\begin{aligned}
H_{II}|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \sum_{n=1}^N \epsilon_n (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2}) |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow)\rangle.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Novamente, como a condição $n_1 = n_2$ não é satisfeita temos que H_{III} é nulo. De modo que, escrevemos a equação de Schroedinger para $n_2 = n_1 + 2$ como:

$$\begin{aligned}
\varepsilon|\Psi(n_1, n_2)\rangle &= \sum_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} \phi_{n_{1\uparrow}, n_{2\downarrow}} [J(|\psi(n_1 + 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 3_\downarrow)\rangle) \\
&\quad + |\psi(n_1 - 1_\uparrow, n_1 + 2_\downarrow)\rangle + |\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 1_\downarrow)\rangle) + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1})|\psi(n_{1\uparrow}, n_1 + 2_\downarrow)\rangle].
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Reunindo as equações (3.14), (3.17), (3.20), podemos escrever as seguintes equações de Schrödinger para cada caso. Para $n_1 = n_2$:

$$\begin{aligned} \varepsilon\phi_{n_1, n_1} &= \phi_{n_1+1, n_1} + \phi_{n_1, n_1+1} + \phi_{n_1-1, n_1} + \phi_{n_1, n_1-1} \\ &+ [2\epsilon_{n_1} - 2eE(t)n_1 + U]\phi_{n_1, n_1} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Enquanto que para $n_2 = n_1 + 1$:

$$\begin{aligned} \varepsilon\phi_{n_1, n_1+1} &= \phi_{n_1+1, n_1+1} + \phi_{n_1, n_1+2} + \phi_{n_1-1, n_1+1} + \phi_{n_1, n_1} \\ &+ [\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+1} - eE(t)(n_1 + 1)]\phi_{n_1, n_1+1} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Por fim, quando $n_2 = n_1 + 2$:

$$\begin{aligned} \varepsilon\phi_{n_1, n_1+2} &= \phi_{n_1+1, n_1+2} + \phi_{n_1, n_1+3} + \phi_{n_1-1, n_1+2} + \phi_{n_1, n_1+1} \\ &+ [\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_1+2} - 2eE(t)(n_1 + 1)]\phi_{n_1, n_1+2}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Comparando as equações (3.21), (3.22), (3.23) podemos analisar os aspectos dinâmicos através da equação da equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \quad (3.24)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\phi_{n_1, n_2}(t) &= \phi_{n_1+1, n_2}(t) + \phi_{n_1, n_2+1}(t) + \phi_{n_1-1, n_2}(t) + \phi_{n_1, n_2-1}(t) \\ &+ [\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} - eE(t)(n_1 + n_2) + U\delta_{n_1, n_2}]\phi_{n_1, n_2}(t). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Adotamos que as energias iônicas são $\epsilon_n = 0$. Adotamos uma unidade de energia de modo que $\hbar = J = e = a = 1$ e expressamos o tempo em unidades de \hbar/J .

Resolvemos numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo (3.25) utilizando método de Runge-Kutta de quarta ordem e também de oitava ordem. Utilizamos um incremento temporal de $\delta t = 10^{-3}$ que se mostrou suficiente para a conservação da norma da função de onda ($1 - \sum_n |\phi_n|^2 \leq 10^{-50}$). A função de onda inicial é dada pelo produto de duas funções de onda que representa cada elétron, dada por:

$$\langle n_1, 1; n_2, 2 | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} \exp\left[-\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2}\right] \exp\left[-\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2}\right] \quad (3.26)$$

onde n_1^0 e n_2^0 são as posições iniciais de cada um dos elétrons. Aplicamos paralelamente sobre a cadeia um campo elétrico pulsado expresso por:

$$E(t) = B(\rho) \exp\left[-\frac{(t - \tau)^2}{4\rho^2}\right]. \quad (3.27)$$

Onde $B(\rho)$ é a constante de normalização, τ é o instante em que o pulso será aplicado/ligado e ρ é a duração do campo pulsado. Calculamos quantidades típicas para a caracterização dinâmica de duas partículas correlacionadas como o centroide e probabilidade de dupla ocupação.

3.2 Resultados

Para entendermos a dinâmica de dois elétrons interagentes em uma cadeia unidimensional, precisamos iniciar através da resolução da equação de Schrödinger independente do tempo e entender a informação por trás dos auto-estados de energia do sistema. Como dito na seção anterior, o espaço de Hilbert para o sistema de dois elétrons em uma cadeia unidimensional é expandido na ordem N^2 . Assim, o Hamiltoniano na sua forma matricial, por exemplo para $N = 3$ sítios, é dado por:

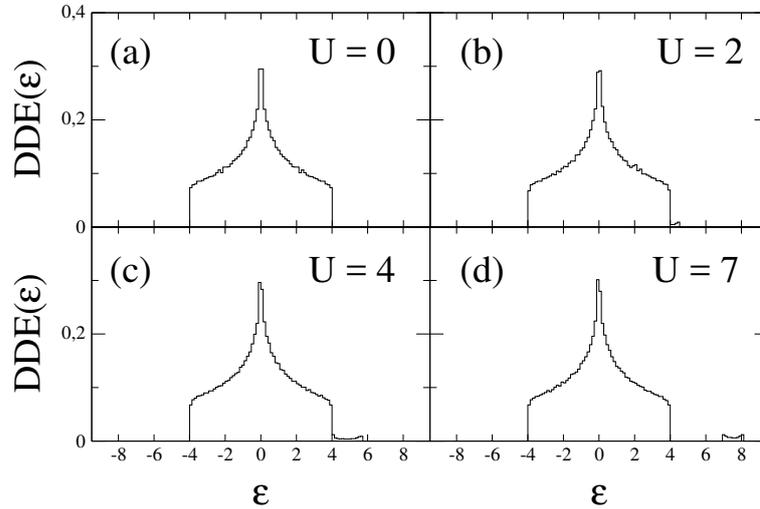
$$H = \begin{array}{c|cccccccccc} N = 3 & |1,1\rangle & |1,2\rangle & |1,3\rangle & |2,1\rangle & |2,2\rangle & |2,3\rangle & |3,1\rangle & |3,2\rangle & |3,3\rangle \\ \hline \langle 1,1| & 2\epsilon_1 + U & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1,2| & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1,3| & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 2,1| & 1 & 0 & 0 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \langle 2,2| & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_1 + U & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \langle 2,3| & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 0 & 0 & 1 \\ \langle 3,1| & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 & 0 \\ \langle 3,2| & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \epsilon_1 + \epsilon_2 & 1 \\ \langle 3,3| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2\epsilon_1 + U \end{array} \quad (3.28)$$

Resolvendo a equação (3.28) por diagonalização direta através da equação sécular: $\det(H - \lambda I) = 0$, podemos construir a figura 17. A densidade de estados (DDE) nos indica a quantidade de níveis de estados disponíveis dentro de um intervalo $\varepsilon + \Delta\varepsilon$. Podemos escrever matematicamente como: $DDE(\varepsilon) = \sum_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i)$, onde ε_i são os autovalores de energia.

Na figura 17 temos a densidade de estados para dois elétrons para diferentes graus de interação de Hubbard. Em (a) temos que o sistema é ausente de interação ($U = 0$), sendo assim, é possível observar que a densidade de estados é parecida para o caso de um elétron em uma rede bidimensional. Como os elétrons não se enxergam ($U = 0$) o sistema recupera as características de partícula única. Para $U > 0$, há o surgimento de uma banda de estados ligados. Isso pode ser visto para em 17 (b), onde temos que em $U = 2$ existe uma superposição entre a banda de estados ligados e a banda de estados não ligados. Quando $U = 4$ em (c), a banda de estados não ligados se torna mais visível. Em 17 (d) temos $U = 7$, podemos ver que a banda de estados ligados encontra-se completamente separada da banda principal. Os autores (CLARO; WEISZ; CURILEF, 2003) mostraram através de cálculos analíticos que os limites da banda de estados ligados dados pela expressão $U \leq \varepsilon \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$, onde J é a energia de salto (*hopping*). Além disso, relatam que o ponto em que ocorre a separação entre as duas bandas é quando $U > 4J$. Com isso, além de reproduzir com boa precisão resultados existentes na literatura, entendemos que, a partir do momento em que ligação a interação entre os elétrons ($U > 0$) teremos o surgimento de uma banda de estados ligados. Esse fenômeno carrega uma grande importância na descrição da dinâmica de elétrons fortemente correlacionados.

Entendido o apresentado anteriormente, podemos calcular os aspectos dinâmicos através da evolução temporal do centróide associado a cada partícula utilizando a equação (3.25). Devido à simetria do estado inicial temos que os centróides das duas partículas apresentam o mesmo

Figura 17 – Densidade de estado para duas partículas interagentes em uma cadeia unidimensional com $N = 1000$ sítios. Em (a) $U = 0$ resgata as características de partícula única em uma rede 2d. (b) $U = 2$ vemos a superposição da banda principal com o surgimento de uma sub-banda. Quando $U = 4$ em (c), temos o limiar da separação entre as duas bandas. Por fim, em (d) com $U = 7$ temos a banda de estados ligados completamente separa da banda principal.



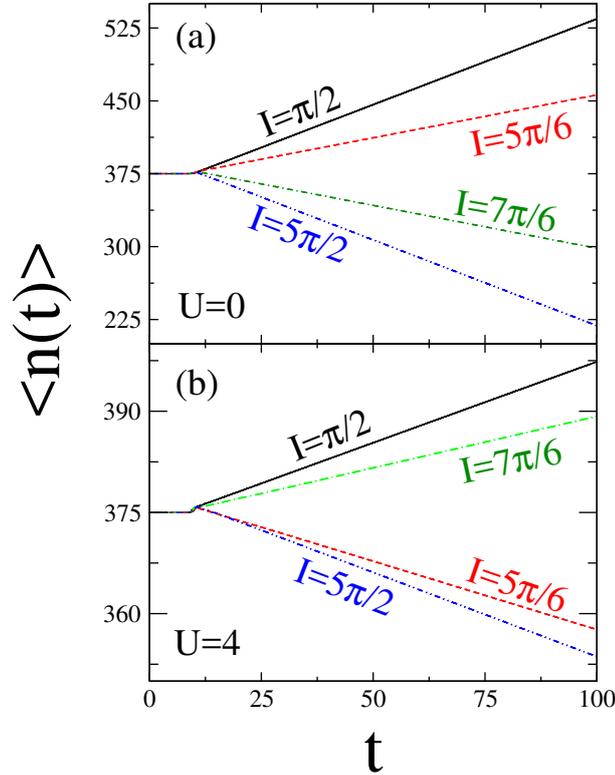
Fonte: Do autor, 2018.

comportamento, ou seja, $\langle n_1(t) \rangle = \langle n_2(t) \rangle$. A figura 18 apresenta o centróide $\langle n(t) \rangle$ para dois elétrons em uma cadeia cristalina unidimensional (1d) com $N = 750$ sítios, arranjados inicialmente no mesmo sítio $n_0 = N/2$. Os elétrons estão sujeitos a um campo elétrico pulsado $E(t)$ com impulsos resultantes $I = \int_{-\infty}^{\infty} E(t)dt$ onde $I = \pi/2, 5\pi/5, 7\pi/6$ e $5\pi/2$. Neste primeiro momento, consideramos dois valores de interação elétron-elétron em (a) $U = 0$ e (b) $U = 4$.

Sabendo disso, a figura 18 (a) representa dois elétrons não interagentes, ou seja, $U = 0$. O comportamento dinâmico apresentado pelo pacote de ondas corresponde à dinâmica de um elétron em uma cadeia unidimensional sob a influência de um campo pulsado, como vimos no Capítulo 2. No entanto, em um sistema em que dois elétrons interagem entre si ($U \neq 0$) o comportamento dinâmico dos pacotes de ondas apresenta dissemelhança com o caso de partículas não interagentes, devido ao surgimento de uma banda de estados ligados. Para $U = 4$ algumas configurações de pulso elétrico I impõem um movimento na direção oposta à observada para o caso em que $U = 0$. Basta olharmos os casos dos campos $I = 5\pi/6$ e $7\pi/6$, em (a) o centróide possui um sentido preferencial unidirecional e ao adicionarmos a interação (figura 18 (b)) os elétrons alteram seu sentido de propagação.

A fim de obtermos uma caracterização mais detalhada da dinâmica do pacote de ondas, calculamos a posição média das partículas para diferentes configurações de campos pulsados. Com os resultados obtidos calculamos a velocidade média do centróide $\langle v(t) \rangle = \Delta x / \Delta t$ para cada valor do impulso resultante do campo elétrico I . Na figura 19 temos $\langle v(t) \rangle \times I(\pi)$ para os

Figura 18 – Evolução temporal da posição média de uma partícula em uma cadeia com $N = 750$ sítios para quatro configurações de campos elétricos pulsados, aplicados em $\tau = 10$ (unidade de tempo). Os impulsos resultantes do campo elétrico são $I = \pi/2, 3\pi/4, 5\pi/4$ e $3\pi/2$. Observa-se que a dinâmica exibida pelas partículas quando a força de interação entre elas é $U = 4, 0$ é distinto do fornecido pelas partículas não interagentes ($U = 0$).



Fonte: Do autor, 2018.

casos em que a largura inicial dos pacotes de ondas são $\sigma = 1$ e $\sigma = 4$ e para três valores de interação (a) $U = 0$; (b) $U = 4$ e em (c) $U = 10$.

Para compreendermos o processo físico apresentado podemos recorrer ao formalismo semi-clássico. Para uma partícula de carga e , o vetor de onda k após um pulso elétrico I aplicado é dado por:

$$k = k_0 + \frac{e}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E(t) dt \quad (3.29)$$

Assim, recorrendo a relação de dispersão de energia de um elétron em um sistema unidimensional $[\varepsilon(k) = 2J \cos(ka) + \varepsilon_n]$ e sua relação com a velocidade de grupo (equação 2.13 do pacote de ondas centrado em torno de algum estado k , o comportamento senoidal é recuperado como mostrado na figura 19 (a). Ao aumentar a largura do pacote de ondas, a dinâmica converge para a descrição semi-clássica com limites $\pm 2Ja/\hbar$.

Para partículas com pacotes de ondas gaussiano com largura $\sigma = 1, 0$ e que interagem com $U = 4, 0$, a velocidade de grupo média apresenta um comportamento distinto para cada impulso. Agora, além da banda de estados não ligados em um intervalo delimitado em $-4J \leq$

$\varepsilon \leq 4J$, há uma banda de estados ligados que abrange o intervalo $U \leq \varepsilon \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ (WEISZ; CLARO, 2003; PEIXOTO; DIAS, 2016). Para encontrarmos a relação de dispersão na presença de interação entre as partículas, partimos da equação de Schrödinger para duas partículas interagentes sujeitas a ação de um campo elétrico:

$$\begin{aligned} \varepsilon\phi(n_1, n_2) = & - J[\phi(n_1 - 1, n_2) + \phi(n_1 + 1, n_2) + \phi(n_1, n_2 - 1) \\ & + \phi(n_1, n_2 + 1)] + (eE(t)na - \delta_{n_1, n_2}U)\phi(n_1, n_2) \end{aligned} \quad (3.30)$$

assumindo que $\phi(n_1, n_2) = e^{ik(n_1+n_2)a}\chi(n_1 - n_2)$ e substituindo na equação (3.30) temos

$$\begin{aligned} \varepsilon e^{ik(n_1+n_2)a}\chi(n_1 - n_2) = & -J[e^{ik(n_1+n_2-1)a}\chi(n_1 - n_2 - 1) \\ & + e^{ik(n_1+n_2+1)a}\chi(n_1 - n_2 + 1) + e^{ik(n_1+n_2-1)a}\chi(n_1 - n_2 + 1) \\ & + e^{ik(n_1+n_2+1)a}\chi(n_1 - n_2 - 1)] \\ & + (eE(t)na - \delta_{n_1, n_2}U)e^{ik(n_1+n_2)a}\chi(n_1 - n_2) \end{aligned} \quad (3.31)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \varepsilon e^{ika}\chi(n_1 - n_2) = & -J[(e^{-ika} + e^{ika})\chi(n_1 - n_2 - 1) \\ & + (e^{ika} + e^{-ika})\chi(n_1 - n_2 + 1)] \\ & + (eE(t)na - \delta_{n_1, n_2}U)e^{ik(n_1+n_2)a}\chi(n_1 - n_2) \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon\chi(n_1 - n_2) = & -2J \cos(ka)[\chi(n_1 - n_2 - 1) + \chi(n_1 - n_2 + 1)] \\ & + (eE(t)na - \delta_{n_1, n_2}U)e^{ik(n_1+n_2)a}\chi(n_1 - n_2) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Na ausência de campo externo $E(t) = 0$ e interação elétron-elétron, $U = 0$ assumimos que $\chi(n_1 - n_2) = e^{i(n_1-n_2)za}$, de modo que,

$$\begin{aligned} \varepsilon e^{i(n_1-n_2)za} = & -2J \cos(ka)[e^{i(n_1-n_2-1)za} + e^{i(n_1-n_2+1)za}] \\ \varepsilon e^{i(n_1-n_2)za} = & -2J \cos(ka)e^{i(n_1-n_2)za}(e^{-iza} + e^{iza}), \end{aligned} \quad (3.34)$$

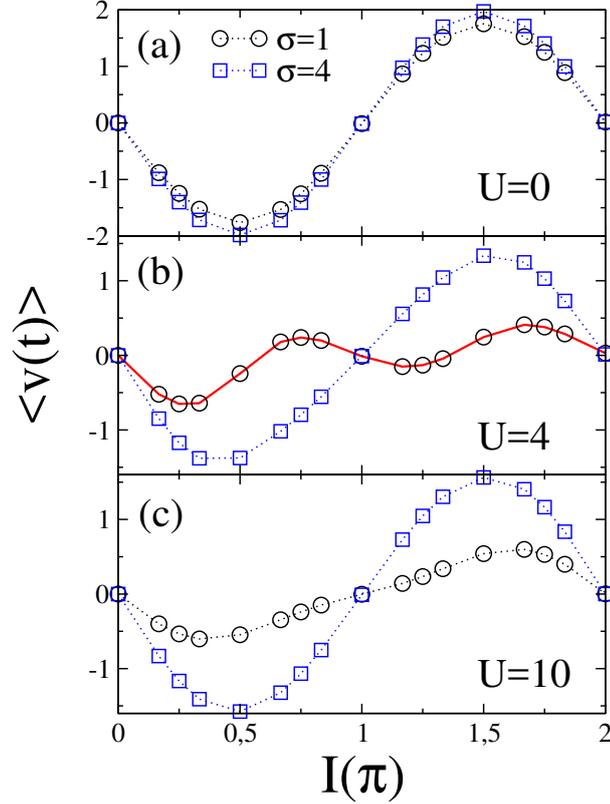
onde chegamos na relação de dispersão que nos mostra a existência de uma banda de estados puros (estados não-ligados)

$$\varepsilon = -4J \cos(ka) \cos(za) \quad (3.35)$$

dentro de um intervalo $-4J \leq \varepsilon \leq 4J$. Esse resultado concorda com a literatura (WEISZ; CLARO, 2003; PEIXOTO; DIAS, 2016). e corrobora com os resultados da figura 17, onde podemos ver a existência de uma banda principal compreendida entre -4 e 4 . Sabendo que a banda de estados ligados cobre o intervalo de $U \leq \varepsilon \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ (CLARO; WEISZ; CURILEF, 2003; DIAS et al., 2007a; LONGHI, 2011), temos que a relação de dispersão é dada por

$$\varepsilon = \sqrt{U^2 + 16J^2} \cos^2(ka). \quad (3.36)$$

Figura 19 – Velocidade média do centroide para cada impulso para as interações (a) $U = 0, 0$; (b) $U = 4, 0$ e (c) $U = 10, 0$. Utilizamos duas condições iniciais para a largura do pacote de ondas $\sigma = 1, 0$ e $\sigma = 4, 0$. Para $U = 0, 0$ o comportamento senoidal corrobora com a descrição semi-clássica para o caso de partículas não interagentes. Por outro lado, quando ligamos a interação entre, a dinâmica das partículas passa a aprensetar uma depência com a banda de estados ligados.



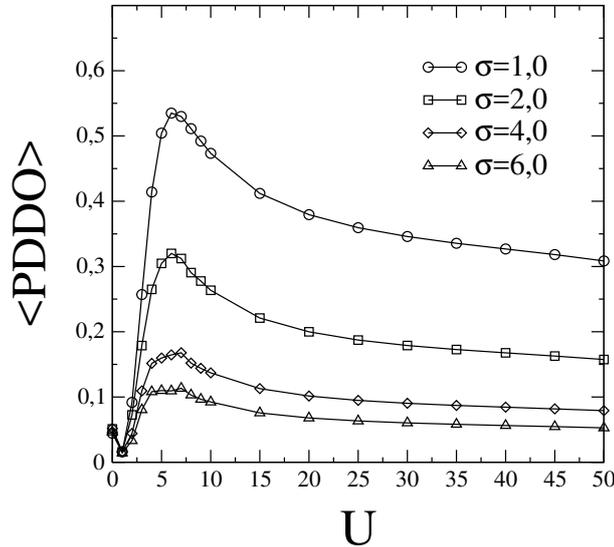
Fonte: Do autor, 2018.

Com esses resultados vemos que para sistemas com duas partículas interagentes a relação de dispersão possui duas contribuições que são dadas pela (3.35) e (3.36). Desta forma, podemos calcular a velocidade de grupo dos pacotes de ondas. Vejamos,

$$\begin{aligned}
 v(k) &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} \\
 &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} \left[\sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)} + 4J \cos(ka) \cos(za) \right] \\
 &= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{-16J^2 a \sin(ka) \cos(ka)}{\sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}} - 4Ja \sin(ka) \cos(za) \right] \\
 &= -\gamma \left[\frac{\alpha \sin(ka) \cos(ka)}{\sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}} + \sin(ka) \cos(za) \right] \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

onde $\gamma = 4Ja/\hbar$ e $\alpha = 4J$ são constantes. Na figura 19 (b) temos que curva continua representa o ajuste feito utilizando a equação (3.37), apresentando um excelente acordo entre os dados obtidos numericamente com a previsão semi-clássica para partículas correlacionadas 19. Outra

Figura 20 – Probabilidade de dupla ocupação $PDDO = \sum_{n_1} \langle |\phi_{n_1, n_1}|^2 \rangle$ em função da energia de interação elétron-elétron U para diferentes larguras de pacotes de ondas $\sigma = 1, 0; 2, 0; 4, 0$ e $6, 0$. Observa-se que existe um valor de U onde a probabilidade de dupla ocupação é máxima. A medida em que aumentamos a largura inicial do pacote de ondas, a probabilidade de dupla ocupação diminui.



Fonte: Do autor, 2018.

questão interessante a ser observada, é que ao aumentarmos a largura dos pacotes de ondas inicial, há uma predominância da banda de estados não ligados e o movimento da velocidade volta a ter uma dependência senoidal. Isso ocorre porque a medida em que aumentamos a largura inicial dos pacotes de ondas a probabilidade de dupla ocupação dos elétrons diminui. Ou seja, se a probabilidade de dupla ocupação é menor e os elétrons só interagem quando estão no mesmo sítio, logo, teremos uma menor influência dos estados ligados. De modo que, a banda principal se torna predominante sobre a dinâmica dos elétrons. Quando a interação entre os elétrons é suficientemente forte $U = 10$, eles encontram-se fortemente ligados pela interação repulsiva e apresenta um comportamento como uma única partícula. É interessante observamos na figura 19 (c) que as partículas voltam a apresentar uma dinâmica com características senoidal. Temos que a banda de estados não-ligados passa a predominar sobre a dinâmica eletrônica. Esse comportamento pode ser verificado através da equação 3.37, quanto maior for o valor de U menor será a contribuição da banda de estados ligados na dinâmica dos elétrons.

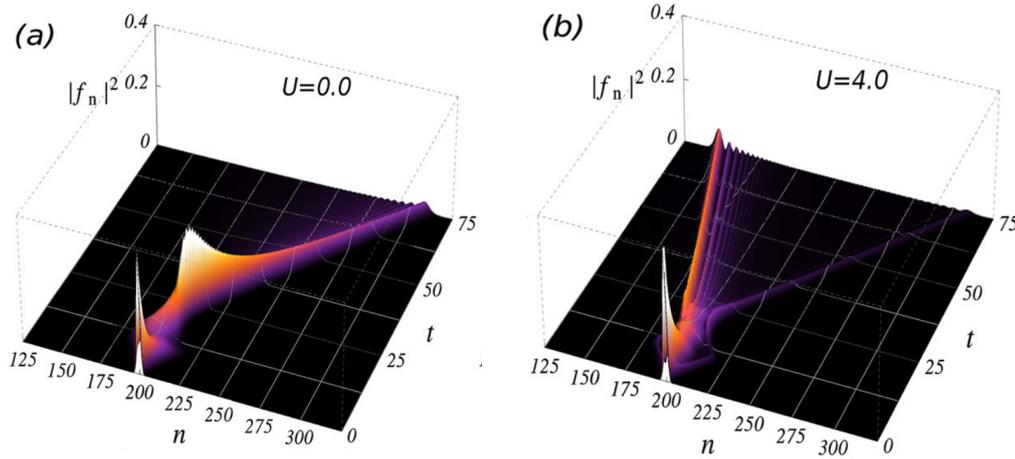
A figura 20 mostra a média temporal da probabilidade de dupla ocupação de dois elétrons interagentes distinguíveis em uma cadeia unidimensional sob ação de um campo elétrico pulsado dada por:

$$PDDO = \sum_{n_1} \langle |\phi_{n_1, n_1}(t)|^2 \rangle \quad (3.38)$$

em função da energia da interação elétron-elétron U .

Podemos observar que na ausência de interação $U = 0$ existe uma pequena probabilidade

Figura 21 – Evolução do perfil da densidade de probabilidade $|\phi|^2$. Em (a) temos a ausência de interação entre as partículas $U = 0$. Em (b) temos uma força de interação elétron-elétron intermediária $U = 4$. Ligamos o campo elétrico pulsado em $\tau = 10$ (unidade de tempo) com impulso total de $I = 5\pi/4$ para (a) e (b).



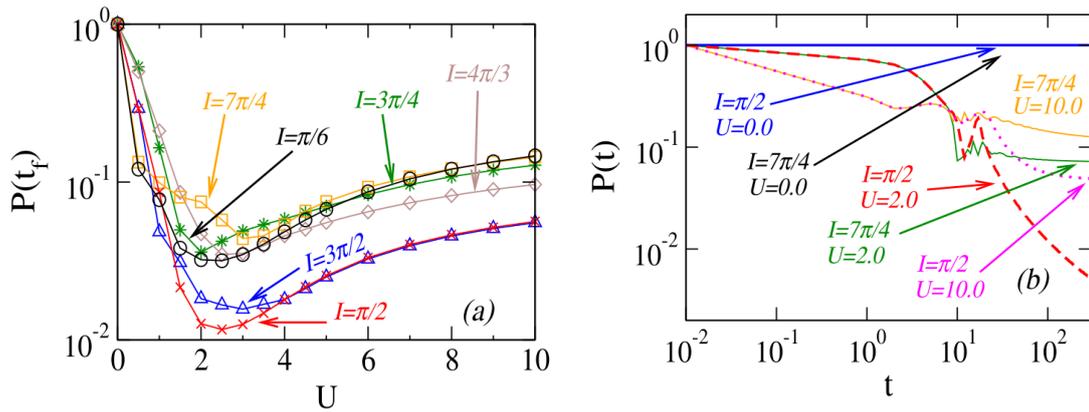
Fonte: Referência (BUARQUE; DIAS, 2017).

de dupla ocupação diferente de zero. Essa ocorrência é consequência de termos um campo elétrico pulsado atuando sobre a cadeia. No instante em que ligamos o campo elétrico os pacotes de ondas são *empurrados* na mesma direção e com a mesma velocidade, mantendo assim uma pequena probabilidade de estarem no mesmo sítio. Para valores $U \neq 0$ temos o surgimento de uma banda de estados ligados que correlaciona a dinâmica das duas partículas, de modo que o sistema apresenta um comportamento coerente à medida que U cresce, como podemos ver na figura 20. Em torno de $U \approx 4$ a probabilidade de dupla ocupação alcança seu valor máximo. A medida que continuamos aumentando o valor de U , a probabilidade de dupla ocupação diminui, este fato nos leva a inferir que a banda principal composta por estados não-ligados volta a ter uma influência maior do que a banda de estados ligados sobre a dinâmica eletrônica. Ainda na figura 20 vemos que quanto mais largo forem os pacotes de ondas iniciais, menor é a probabilidade de dupla ocupação. Com isso, é mais provável que a dinâmica dos elétrons seja regida pela banda de estados não-ligados, corroborando os resultados apresentados anteriormente (ver figura 19).

Na figura 21 temos o perfil da densidade de probabilidade $|\phi_n|^2$ de dois elétrons interagentes em uma cadeia unidimensional com $N = 500$ sítios. Para a configuração da figura 21 (a) onde as partículas não interagem $U = 0$, temos que, após a aplicação do pulso elétrico com intensidade $I = 5\pi/4$, todo o pacote de onda é conduzido a executar um transporte em uma direção preferencial ao longo da cadeia, da mesma maneira que uma partícula única (ver Capítulo 2). No entanto, ao ligarmos a interação entre os elétrons $U = 4$, observamos em figura 21 (b) o surgimento de duas frentes de onda em direções opostas. Uma associada aos estados não ligados (para a esquerda do sítio inicial) e outra aos estados ligados (a direita dos sítio inicial).

Estes resultados sugerem que a conexão entre a força de interação elétron-elétron e a amplitude das frações dos pacotes de ondas estão relacionadas ao caráter competitivo entre os

Figura 22 – Em (a) Pureza $P(t)$ para cada valor de U . Utilizamos diversos valores para o impulso elétrico. Observamos que para os impulsos que promovem a velocidades máxima ($I = \pi/2, 3\pi/2$) para a banda de estados não ligados, o grau de emaranhamento entre os dois elétrons é maior. Em (b) Evolução temporal da função pureza $P(t)$. Utilizamos três intensidades de interação: $U = 0, 2$ e 10 . Para uma força intermediária de interação, a evolução temporal indica que o pacote de ondas desenvolve um aumento continuamente crescente de emaranhamento quântico quando o pulso elétrico promove maior velocidade a banda de estados ligados



Fonte: Referência (BUARQUE; DIAS, 2017).

estados ligados e estados não ligados. Para valores intermediários de interação entre os elétrons, observa-se um forte acoplamento entre eles, de modo que a fração do pacote de ondas não ligada é muito menor que a de estados ligado. Isso indica que os estados estão mais fortemente emaranhados. Para quantificar o grau de emaranhamento da função de onda de duas partículas interagentes, calculamos a pureza que é definida por:

$$P(t) = \text{tr} \rho_1^2(t), \quad (3.39)$$

onde ρ_1 é a matriz densidade reduzida para a partícula 1 obtida depois de tomar o traço parcial sobre os estados da partícula 2. A pureza nos informa o quão emaranhado está um sistema. Se $P(t) = 1$ temos que os estados são puros, enquanto que, para $1/d \leq P(t) < 1$ os estados estão correlacionados, onde d é a dimensão do espaço de Hilbert.

Na figura 22 (a) temos a pureza calculada para 100 unidades de tempo $P(t_f)$ para cada valor de interação de Hubbard U para dois elétrons inicialmente no mesmo sítio em sistemas com diferentes impulsos resultantes aplicados. Observamos que a medida em que aumentamos a interação entre os elétrons há um crescimento no emaranhamento entre eles. No entanto, esse comportamento não é monotônico. A partir de um determinado valor de interação a pureza apresenta um leve aumento. Isto ocorre devido ao caráter competitivo entre estados ligados e estados não ligados. É interessante observarmos que o grau de emaranhamento é maior para os pulsos elétricos que promovem velocidades de grupo maiores para a porção do pacote de ondas de estados não ligados (banda principal), que são $I = \pi/2$ e $I = 3\pi/2$ (ver figura 22 (a)).

Acompanhando a evolução temporal da pureza para alguns valores de interação de

Hubbard, temos na figura 22 (b) a pureza em função do tempo. Utilizamos $U = 0, 2, 10$ e os impulsos elétricos $I = 7\pi/4, \pi/2$. Enquanto as duas partículas não estão emaranhadas quando $U = 0$, para $U = 2$ e impulso $I = \pi/2$ a função pureza diminui mais rapidamente no tempo. Para $I = 7\pi/4$ e $U = 2$ os estados se tornam emaranhados no entanto diminuem mais lentamente no tempo, o que corrobora com os resultados da 22 (a). Quando aumentamos a interação U existe um enfraquecimento do emaranhamento entre os elétrons. Reforçando o fato de que os estados não ligados voltam a desempenhar uma maior contribuição sobre a dinâmica dos pacotes de ondas.

3.3 Conclusões

Em suma, descrevemos a dinâmica de duas partículas correlacionadas em uma cadeia unidimensional 1d sob ação de um campo elétrico pulsado dependente do tempo. Utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem para resolvermos a equação de Schrödinger dependente do tempo e calculamos quantidades típicas para caracterizar a dinâmica eletrônica, como também, para caracterizar o grau de correlação entre as partículas.

Introduzimos uma ferramenta para gerar e manipular espacialmente estados emaranhados de duas partículas, conduzindo-os através da utilização de um campo elétrico pulsado. Mais especificamente, nossos resultados mostraram que estados ligados e estados não-ligados de um pacote de ondas inicialmente emaranhado podem ser controlados separadamente. Com isso, foi possível dividir o pacote de ondas em duas porções que desenvolveram um transporte unidirecional, com velocidade e direção de cada fração do pacote de ondas controladas pelo campo pulsado. O campo elétrico pode ser ajustado de modo a fazer com que os estados ligados e não ligados caminhem para a mesma direção ou em direções opostas.

A amplitude de cada modo está relacionada ao grau de emaranhamento dos dois elétrons, que apresenta uma dependência não monotônica com a interação elétron-elétron. Esse comportamento vem do caráter competitivo entre a banda de estados ligados e a banda de estados não-ligados. Embora a interação favoreça o salto (*hopping*) coerente associado aos estados ligados, a medida em que aumentamos a interação entre as partículas a probabilidade de dupla ocupação diminui.

Nossa análise é baseada em observáveis que podem ser verificados experimentalmente, tais como a densidade de probabilidade do pacote de ondas e a pureza quântica. Recentes experimentos desenvolvidos utilizando esses observáveis (PREISS et al., 2015), indicam que o esquema proposto em nosso trabalho é viável em sistemas de átomos ultra-frios armadilhados em redes ópticas unidimensionalmente sob um campo pulsado. Esperamos que nosso trabalho possa impulsionar novas investigações visando a manipulação de partículas emaranhadas em sistemas nanométricos.

Esse trabalho foi publicado na revista *Physics Letters A* no ano de 2017 (ver anexo B).

4 Criação e transporte de estados auto-armadilhados em cadeias não-lineares

Até o momento, vimos dois tipos de sistemas: no capítulo 2 tratamos de um elétron em uma cadeia periódica unidimensional sob a ação de um campo externo pulsado. No capítulo 3 adicionamos mais um ingrediente ao nosso sistema, a interação entre dois elétrons. Neste capítulo 4 estudaremos um modelo teórico onde o elétron interage com os íons da rede através de um acomplamento elétron-rede, conhecida também como interação elétron-fônon.

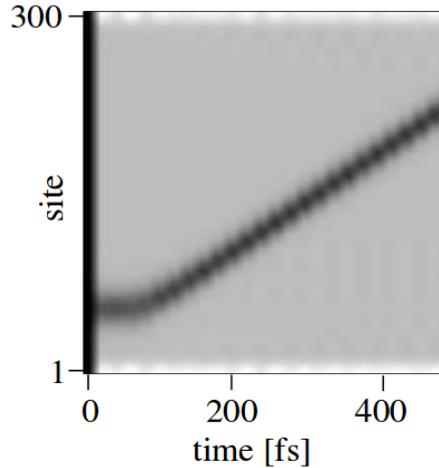
Estados auto-armadilhados em sistemas periódicos receberam nos últimos anos uma vasta atenção da comunidade científica, com estudos que abrangem diferentes ramos da ciência como mecânica quântica (AYCOCK et al., 2017), ótica não-linear (CHEN; MILLS, 1987; LONGHI; JANNER, 2004; LEBLOND; KREMER; MIHALACHE, 2017), física do estado sólido (SU; SCHRIEFFER; HEEGER, 1979) entre outras plataformas. Muitos fenômenos biológicos estão relacionados à transferência de elétrons através de estruturas moleculares, cujo mecanismo de movimento de elétrons foi associado à interação entre elétrons e modos vibracionais da rede. Essa interação promove um processo eletrônico conhecido como formação de elétron-sóliton, que estabiliza seu movimento e favorece a condutividade através de moléculas (SCOTT, 1992; YAMADA; IGUCHI, 2010). O transporte de carga em polímeros também foi associado a estados auto-presos como sólitons, pólarons ou bipólarons.

Com o objetivo de explicar o comportamento de condutividade do trans-poliacetileno, Su, Schrieffer e Heeger (SSH) propuseram um modelo de uma ligação simples e unidimensional que inclui uma interação elétron-fônon (SU; SCHRIEFFER; HEEGER, 1979). Esta interação está relacionada à dependência da transferência integral com o espaçamento e orientações relativas dos sítios adjacentes. Desde então, o modelo SSH tem utilizado em inúmeras investigações sobre as propriedades de transporte em

Buscando entender como se dava a migração de um pólaron através de uma cadeia unidimensional, os autores (JOHANSSON; STAFSTRÖM, 2001) mostraram que esse movimento unidirecional depende fortemente da intensidade do campo elétrico. Eles utilizaram o modelo de SSH acrescido de um termo para representar a ação do campo elétrico externo dado pela expressão: (JOHANSSON; STAFSTRÖM, 2001; FU et al., 2006; MA; SCHOLLWÖCK, 2008; DI et al., 2011; HONG-XIA et al., 2015)

$$E(t) = \begin{cases} E_0 \exp[-(t - T_C)^2/T_w^2], & t < T_c \\ E_0, & t \geq T_c \end{cases} \quad (4.1)$$

Figura 23 – Evolução da distribuição do parâmetro de ordem escalonado r_n de um polaron movendo-se em uma cadeia com 300 sítios sob ação de um campo externo $E_0 = 1,0 \text{ mV/\text{Å}}$.



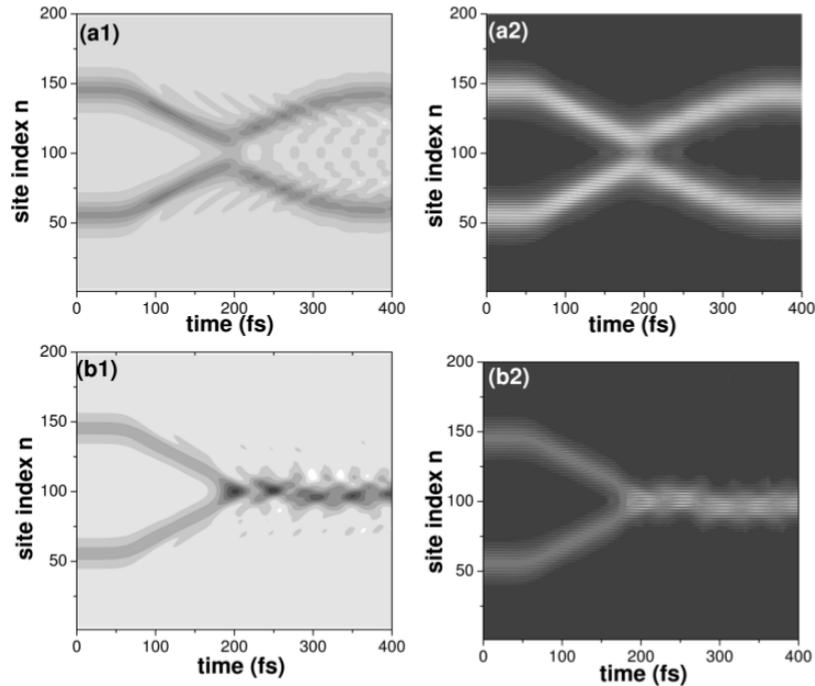
Fonte: Retirada da referência (JOHANSSON; STAFSTRÖM, 2001).

onde T_c é o período de ativação do campo elétrico gaussiano, T_w representa a duração do campo e E_0 é a intensidade do pulso. Na figura 23 temos a evolução temporal do parâmetro de ordem escalonado definido por: $\delta_n \equiv (-1)^n(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})/4$ onde u_n representa o deslocamento do sítio n na cadeia. Vemos que o polaron realiza um movimento unilateral com uma velocidade constante. Esse comportamento ocorre devido as características do campo externo em conjunto com a não linearidade da cadeia.

Na referência (DI et al., 2011) é reportada o modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) unidimensional associado ao modelo de Hubbard estendido sob ação de um campo elétrico externo 4.1. Os autores analisaram a dispersão e a combinação em polímeros conjugados de dois polarons com as mesmas cargas e spins paralelas e antiparalelas. Acompanhando a evolução da distribuição do parâmetro de ordem escalonado (δ_n), foi possível indentificar que a colisão entre dois polarons de mesma carga e com spins paralelos é essencialmente elástica. Isso ocorre devido ao princípio de Pauli. No entanto, para o caso em que os dois polarons de mesma carga e com spins antiparalelos se combinam em um estado bipolarônico de singleto. Na figura 24 os autores identificam o comportamento dinâmico de dois polarons de elétrons com (a) spins paralelo e dois polarons com (b) spins antiparalelo. Entender esse resultado é interessante para aplicabilidade em eletroluminescência. A recombinação de polarons é o passo chave atrás do mecanismo de eletroluminescência em dispositivos orgânicos emissores de luz (SUN; STAFSTRÖM, 2012; HONG-XIA et al., 2015).

Além disso, diversos trabalhos que buscam entender os efeitos da não linearidade e campos externos na formação e condução de polarons tem sido amplamente estudados, como por exemplo, o efeitos do campo elétrico sobre estados auto-armadilhados (FU; GUO; SUN,

Figura 24 – Na coluna da esquerda (a1) e (b1) temos a evolução da distribuição do parâmetro de ordem escalonado δ_n . Na coluna da direita (a2) e (b2) temos a distribuição de carga ρ_n entre os dois polarons de elétrons com spins paralelos e antiparalelos para uma intensidade de campo elétrico intermediária, $E_0 = 1, 5mV/\text{Å}$.



Fonte: Retirada da referência (DI et al., 2011).

2000), campo não uniforme (YANG et al., 2016), transporte de carga assistido por armadilha em interfaces de polímero conjugado (JUNIOR; BRITO; NETO, 2016), formação de polaron em uma estrutura heterogênea (WU et al., 2003) onde os autores investigam a formação de polarons conduzidos por um campo externo em uma estrutura unidimensional formada por três interfaces metal-polímero-metal. Eles mostram que ao injetarem o elétron na cadeia de polímero sob a ação de um campo elétrico fraco, começam a surgir estados auto-armadilhados que se movem lentamente.

Assim, seguindo esta linha de investigação, pretendemos contribuir com uma previsão, estabilidade e características dinâmicas dos estados eletrônicos auto-armadilhados em uma cadeia cristalina unidimensional não-linear submetida a um campo elétrico externo. Aqui, a não-linearidade surge devido as vibrações da cadeia e os campos elétricos dependentes do tempo são de curta duração (como pulsos), sendo ligados e desligados suavemente. Assumimos uma aproximação adiabática e que a dependência das integrais de salto é tão fraca que pode ser ignorada. Nossos resultados oferecem o ajuste apropriado do campo elétrico para promover a formação e transporte unidirecional de estados auto-armadilhados através da cadeia.

4.1 Modelo e Formalismo

Nosso modelo consiste em um elétron movendo-se em uma cadeia regular unidimensional constituída por N sítios e sujeito a ação de um campo elétrico dependente do tempo $E(t)$. Cada íon da cadeia realiza pequenas oscilações com a mesma frequência em torno de sua posição de equilíbrio. Além disso, o elétron interage com as vibrações dos íons através de um acoplamento elétron-rede.

Essas considerações nos levam ao Hamiltoniano que é composto por $\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_e + \hat{H}_{int}$. Onde, \hat{H}_c representa o Hamiltoniano da cadeia; \hat{H}_e o Hamiltoniano referente a energia eletrônica e \hat{H}_{int} o Hamiltoniano que representa a interação entre o elétron e os modos vibracionais da cadeia (fônons).

Escrevendo o hamiltoniano geral que leva em consideração o acoplamento da partícula aos fônons acústicos e ópticos, de modo que, tanto os potenciais locais como os de integral de transferência possuem uma dependência com os modos vibracionais da cadeia, temos que:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{M} + M\omega_a^2(u_{n+1} - u_n)^2 \right\} + \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{P_n^2}{M} + M\omega_0^2\nu_n^2 \right\} \\ &+ \sum_n \beta(V_0 + u_{n+1} - u_n) (|\psi_n\rangle\langle\psi_{n+1}| + |\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n|) \\ &+ \sum_n (\epsilon_n - eE(t)na) |\psi_n\rangle\langle\psi_n| + \gamma_n \nu_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde M é a massa da célula unitária, p_n e P_n são seus momentos conjugados, u_n and ν_n são deslocamentos da rede e vibrações internas da n -ésima célula unitária, respectivamente. Enquanto que ω_o é a frequência de oscilação dos fônons ópticos e ω_a de fônons acústicos. β e γ_n são as constantes de acoplamento, enquanto que V_0 é o termo de hopping e ϵ_n é a energia potencial de cada íon.

Podemos representar a função de onda eletrônica em funções de Wannier $|\Phi(t)\rangle = \phi_n(t)|n\rangle$, onde $\phi_n(t)$ são amplitudes de Wannier. Utilizando a equação de Hamilton para resolvermos a dinâmica da rede temos, $\frac{dp_n(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_n(t)}$. É interessante observar que para resolver a parte do Hamiltoniano que envolve a energia eletrônica (H_e) é preciso calcular primeiro o seu valor esperado de H_e , devido ao fato de se tratar de um operador quântico. Com isso, podemos escrever que: $\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_{int} + \langle\Phi(t)|\hat{H}_e|\Phi(t)\rangle$. Em seguida temos,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= -\omega_a [2u_n(t) - u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)] \\ &+ 2\beta \text{Re}[\phi_{*n+1}(t)\phi_n(t) - \phi_{*n-1}(t)\phi_n(t)] \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\frac{d^2 \nu_n(t)}{dt^2} = -\omega_o^2 \nu_n(t) + \gamma |\phi_n(t)|^2 \quad (4.4)$$

$$i\hbar \frac{d\phi_n}{dt} = [\epsilon_n - eE(t)na + \gamma \nu_n] \phi_n(t) + \sum_m J_{nm} \phi_m, \quad (4.5)$$

onde $J_{nm} = \beta(V_0 + u_m - u_n)$. Considerando uma aproximação de primeiros vizinhos, podemos assumir que a dependência da integral de transferência em u_n é tão fraca que pode ser desprezada,

de modo que o termo de salto (*hopping*) passa a ser uniforme, ou seja, $J_{nm} = J$. Assim, temos:

$$i\hbar \frac{d\phi_n(t)}{dt} = J \sum_n [\phi_{n+1}(t) + \phi_{n-1}(t)] + [\epsilon_n - eE(t)na] \phi_n(t) - \gamma_n \nu_n \phi_n(t) \quad (4.6)$$

Utilizamos a aproximação adiabática, onde o movimento de vibração de cada sítios da cadeia é tão lento que atinge a posição de equilíbrio em uma escala de tempo muito menor que o tempo de evolução do pacote de ondas eletrônico. Ou seja, podemos tratar os estados quânticos da rede constante em toda evolução temporal e obtemos que, $\omega_0^2 \nu_n = \gamma_n |\phi_n(t)|^2$. Substituindo esse resultado na equação (4.6) encontramos que a equação de Schrödinger é dada por:

$$i\hbar \frac{d\phi_n(t)}{dt} = \sum_n J [\phi_{n+1}(t) + \phi_{n-1}(t)] + [\epsilon_n - eE(t)na] \phi_n(t) - \frac{\gamma_n^2}{\omega_0^2} |\phi_n(t)|^2 \phi_n(t),$$

ou ainda,

$$i\hbar \frac{d\phi_n(t)}{dt} = \sum_n J [\phi_{n+1}(t) + \phi_{n-1}(t)] + [\epsilon_n - eE(t)na] \phi_n(t) - \chi_n |\phi_n(t)|^2 \phi_n(t). \quad (4.7)$$

Onde $\chi_n = \gamma_n^2/\omega_0^2$ representa o acoplamento elétron-fônon efetivo no sítio n . Adotamos que a energia potencial de cada íon é $\epsilon_n = 0$ sem perda de generalidade e que o tempo é expresso em unidade de \hbar/J .

Motivados por investigações em sistemas onde há o aparecimento de estados auto-armadilhados sujeitos a aplicação de um campo elétrico pulsado (JOHANSSON; STAFSTRÖM, 2001; ??; DI et al., 2011; HONG-XIA et al., 2015), consideramos um campo elétrico externo com a forma de um pulso gaussiano dado pela equação

$$E(t) = E_0 \exp \left[-\frac{(t - \tau)^2}{4\rho^2} \right] \quad (4.8)$$

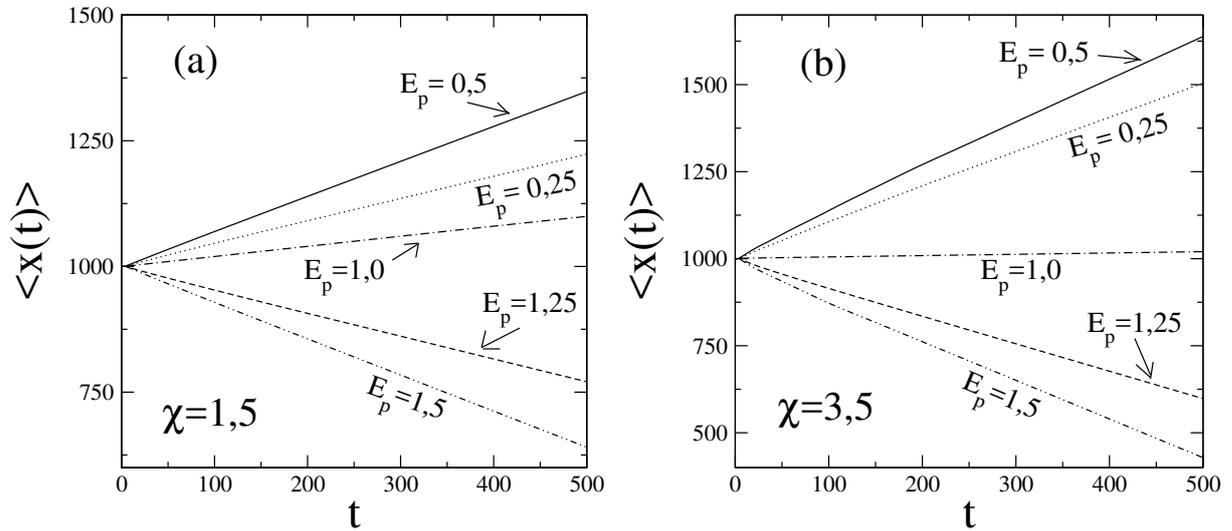
onde ρ controla a duração de cada pulso e τ é o instante em que o pulso será aplicado. Em nossos cálculos utilizamos $\rho = 0,5$ e $\tau = 3,5$ (u.t.) e vários valores para o campo elétrico E_0 . Adotamos as unidades $\hbar = J = e = a = 1$ sem perda de generalidade.

Resolvemos a equação (4.7) através do método de Runge-Kutta de quarta ordem, com incremento temporal $\delta t = 10^{-3}$ ao longo de todo o intervalo de tempo considerado. Todos os resultados apresentados desprezam totalmente os efeitos de borda. Consideramos o elétron inicialmente localizado no centro da cadeia $n_0 = N/2$, ou seja, $\langle \phi_n | \phi_{n_0} \rangle = \delta_{n,n_0}$. Através da abordagem descrita acima, calculamos quantidades típicas que podem trazer informações sobre a dinâmica do pacote de ondas, como a posição média $\langle x(t) \rangle = \sum_n n |\phi_n(t)|^2$, função participação $P(t) = 1/\sum_n |\phi_n(t)|^4$, a probabilidade de encontrarmos a partícula no sítio inicial $R(t) = |\phi_{n_0}(t)|^2$ entre outras.

4.2 Resultados

Iniciemos nossa discussão mostrando brevemente o comportamento de uma função de onda inicialmente localizada em um sítio n_0 , ou seja, $\langle \psi_n | \psi_{n_0} \rangle = \delta_{n,n_0}$, em uma cadeia

Figura 25 – Evolução temporal do centroide de pacote de ondas inicialmente tipo delta em uma cadeia cristalina não-linear com $N = 2000$ sítios, disposto inicialmente em $n_0 = N/2$ sob a ação de campos elétricos pulsados com intensidades $E_p = 0, 25; 0, 5; 1, 0; 1, 25$ e $1, 5$. Em (a) foi utilizado um parâmetro de acoplamento elétron-fônon $\chi = 1, 5$ e (b) $\chi = 3, 5$.



Fonte: Do autor, 2018.

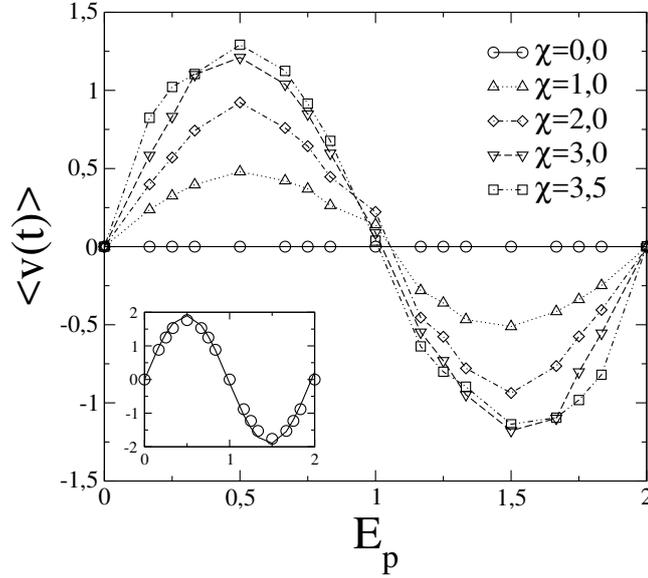
cristalina submetido a ação de um campo externo e na ausência das vibrações da rede. Utilizando o Hamiltoniano de ligação forte (*tight – binding*) e de primeiros vizinhos dado pela equação 2.3, e acompanhamos sua evolução temporal vemos que o pacote de ondas evolui de modo evolui de forma em que a sua posição média permanece constante ($\langle \hat{N}(t) \rangle = 0$) independente da ação do campo elétrico sobre a cadeia ¹ (HARTMANN et al., 2004; DOMÍNGUEZ-ADAME, 2010; CAETANO; LYRA, 2011b).

Na ausência das vibrações da rede, vimos que a posição média do pacote de ondas, quando a condição inicial da função de onda é localizada em um sítio da rede, permanece constante. No entanto, ao adicionarmos interação elétron-fônon em nosso sistema, o centróide do pacote de ondas apresenta um comportamento dinâmico. Os painéis (a) $\chi = 1, 5$ e (b) $\chi = 3, 5$ na figura 25 revelam que para um grau de acoplamento elétron-fônon de intensidade fraco e intermediário a posição média da partícula realiza um movimento unidirecional no qual a o sentido de propagação é definido de acordo com as características do campo $E_p = E_0/\sqrt{\pi} = 0, 25; 0, 5; 1, 25; 1, 5$.

Para entendermos melhor a dinâmica do pacote de ondas apresentada anteriormente, realizamos a evolução temporal do centróide da partícula para diferentes configurações de campo elétrico pulsado e, em seguida, calculamos sua velocidade média $\langle v(t) \rangle = \Delta x/\Delta t$ para cada intensidade E_p do campo. Na figura 26 temos o resultado obtido para cinco sistemas cujos acoplamentos elétron-fônon são: $\chi = 0; 1; 2; 3$ e $3, 5$. Na ausência de acoplamento elétron-fônon ($\chi = 0$), a posição média da partícula é constante, o que implica que sua velocidade de

¹ Para mais detalhes recomendamos consultar o Apêndice] A.

Figura 26 – Velocidade média do centroide do elétron em uma rede cristalina sob ação de um campo pulsado aplicado em $\tau = 3,5$ (u.t.). Variamos o parâmetro que regula a intensidade da interação elétron-fônon de $\chi = 0$ até $\chi = 3,5$. Mostramos que a medida em que vamos aumentando o valor de χ , o centroide da partícula adquire mobilidade, alcançando sua velocidade média máxima em $\chi \approx 3,5$.



Fonte: Do autor, 2018..

grupo média é nula. No entanto, a medida em que vamos aumentando de χ o sistema começa a apresentar uma dependência senoidal da velocidade média do centroide em relação ao campo elétrico pulsado aplicado.

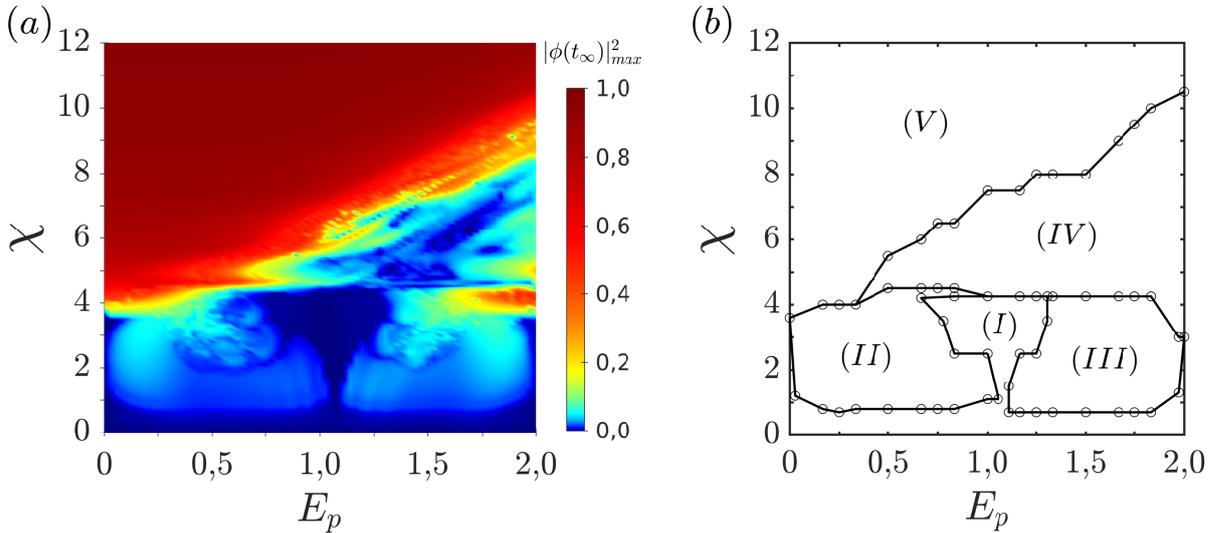
É interessante observar que a medida em que aumentamos o valor de χ a velocidade média também aumenta. Este resultado é perceptível também na figura 25, a medida que aumentamos o valor da interação elétron-fônon, o centroide da partícula percorre mais sítios no mesmo intervalo de tempo. Dentro deste regime de mobilidade do pacote de ondas ($\chi < \approx 3,75$), a velocidade de grupo média obedece a relação semi-clássica $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} \varepsilon(k)$. A velocidade eletrônica então é dada por $v(k) = -\frac{2Ja}{\hbar} \sin(ka)$. Como o campo elétrico $E(t)$ impulsiona a evolução temporal do momento linear, $d(\hbar\vec{k})/dt = eE(t)$, obtemos que:

$$v(k) = -\frac{2Ja}{\hbar} \sin \left(k_0 a + \frac{ea}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E(t) dt \right). \quad (4.9)$$

Vemos através da equação (4.9) que o campo elétrico pulsado modifica o vetor de onda inicial do pacote de ondas.

Observamos que nesse intervalo a função de onda inicialmente localizada no sítio n_0 resgata características de uma função de onda gaussiana em uma cadeia cristalina sem interação elétron-fônon. No *inset* da figura 26 temos a velocidade de grupo média para um pacote de ondas que inicialmente possui a forma de uma distribuição gaussiana em termos do campo elétrico aplicado. A curva contínua é o ajuste feito através da equação (4.9).

Figura 27 – Diagrama de fase do acomplamento elétron-fônon \times do campo elétrico pulsado aplicado. A intensidade das cores são de acordo com a média da densidade de probabilidade máxima no limite assintótico $|\phi_n(t_\infty)|^2$.



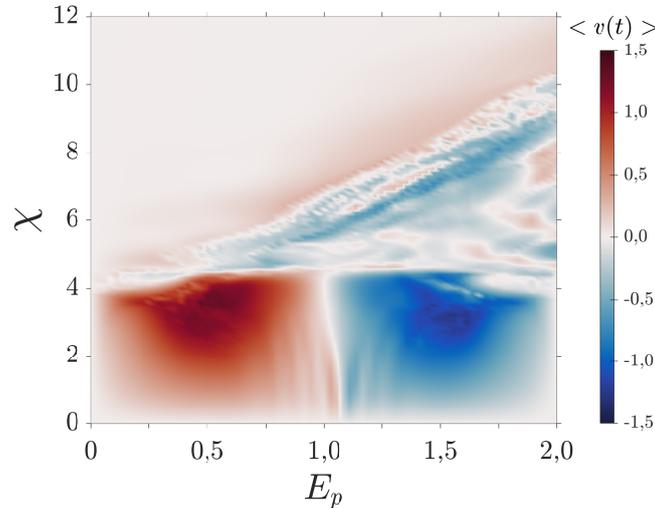
Fonte: Do autor, 2018.

Para apresentarmos uma descrição completa da dinâmica do sistema, montamos um diagrama de fase da densidade de probabilidade máxima $|\phi_n(t_\infty)|^2_{\max}$ no plano $E_p \times \chi$, ver figura 27. Em (a) temos que as cores representam a densidade de probabilidade máxima no limite assintótico. Em (b) temos um mapa da figura (a) definindo os limites de cinco regimes, onde em cada um destes o pacote de onda apresenta comportamento distinto. A linha tênue que separa estes regimes contém uma margem de erro de aproximadamente $\chi \pm 0,2$ no valor do acomplamento elétron-fônon.

Na região (I), temos que todos os estados são estendidos. O pacote de ondas apresenta duas frentes que se propagam em direções opostas, visitando todos os sítios da cadeia. É interessante descrevermos que a partir do momento em que consideramos a interação entre o elétron e os modos vibracionais da cadeia, em conjunto com a aplicação do campo elétrico pulsado, o pacote de ondas começa a apresentar um movimento de propagação com uma direção preferencial que é regida pela intensidade do campo elétrico, com vimos anteriormente. No entanto, estes modos não mantêm uma amplitude constante a medida que o tempo evolui. Sendo assim, essa região caracteriza-se como uma região onde os estados são estendidos, em que, no limite assintótico, o pacote de ondas se espalha pela cadeia..

Em (II) o sistema apresenta um regime onde o pacote de ondas exibe estados auto-armadilhados móveis que se deslocam para o lado direito da cadeia. Na região (III) também temos estados auto-armadilhados móveis, porém, que se deslocam para o lado esquerdo da cadeia. Nestes regimes (I), (II) e (III) o comportamento dinâmico é descrito pela análise semi-clássica exibida anteriormente. Este resultado mostra a possibilidade de um movimento bem controlado

Figura 28 – Diagrama de fase do acoplamento elétron-fônon \times do campo elétrico pulsado aplicado. A intensidade das cores são de acordo com a velocidade de grupo média $\langle v(t) \rangle$.



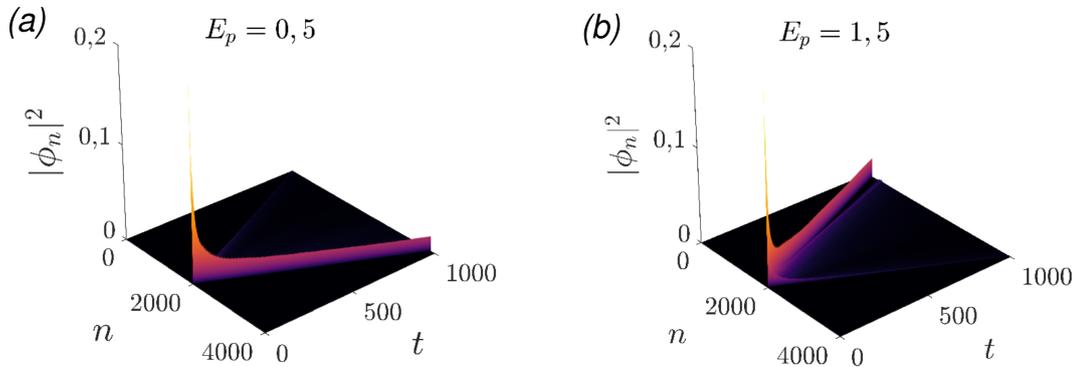
Fonte: Do autor, 2018.

(através do campo elétrico pulsado) de estados eletrônicos auto-armadilhados em uma cadeia pura não-linear.

A medida em que aumentamos a intensidade do acoplamento elétron-fônon o sistema apresenta uma dinâmica sensível a cada incremento em χ . Esta sensibilidade começa a ocorrer para valores acima de um χ_{cri} . Este valor de χ_{cri} tem uma pequena flutuação em seu valor a depender da intensidade do campo elétrico aplicado. Dentro desta região (IV) não temos um comportamento contínuo, a cada mudança mínima de χ o pacote de ondas apresenta uma dinâmica diferente. Pode-se encontrar modos de estados auto-armadilhados se deslocando para o lado esquerdo da cadeia, como também para a direita. Existe também pontos em que há o surgimento de multi-modos auto-armadilhados transladando em uma direção preferencial e/ou direções opostas. Como também regiões delocalizadas. Vemos então, que nesta região (IV), a dinâmica do pacote de ondas não é mais regida pela intensidade do campo elétrico pulsado e sim pelo parâmetro de acoplamento elétron-fônon. Uma vez que, para um mesmo valor de E_p o sistema apresenta comportamentos variados a depender de χ .

Na região (V) o pacote de ondas encontra-se em um regime de auto-armadilhamento total no sítio inicial n_0 . É interessante observamos que a medida em que aumentamos a intensidade do campo elétrico pulsado a região em que a dinâmica é não definida aumenta, como também o χ para o auto-armadilhamento no sítio inicial. Este fato corrobora com estudos realizados em sistemas em que os autores utilizam outras configurações de campo elétrico e mostram que quanto maior a intensidade do campo elétrico aplicado sobre a cadeia cristalina não-linear, maior é o valor do acoplamento elétron-fônon χ necessário para realizar o auto-armadilhamento em n_0 (DATTA; JAYANNAVAR, 1998b).

Figura 29 – Perfil da evolução temporal da densidade de probabilidade $|\phi_n|^2$ em uma cadeia com $N = 4000$ sítios e acoplamento elétron-fônon $\chi = 1,5$. Em (a) aplicamos um campo elétrico pulsado $E_p = 0,5$ e (b) $E_p = 1,5$.



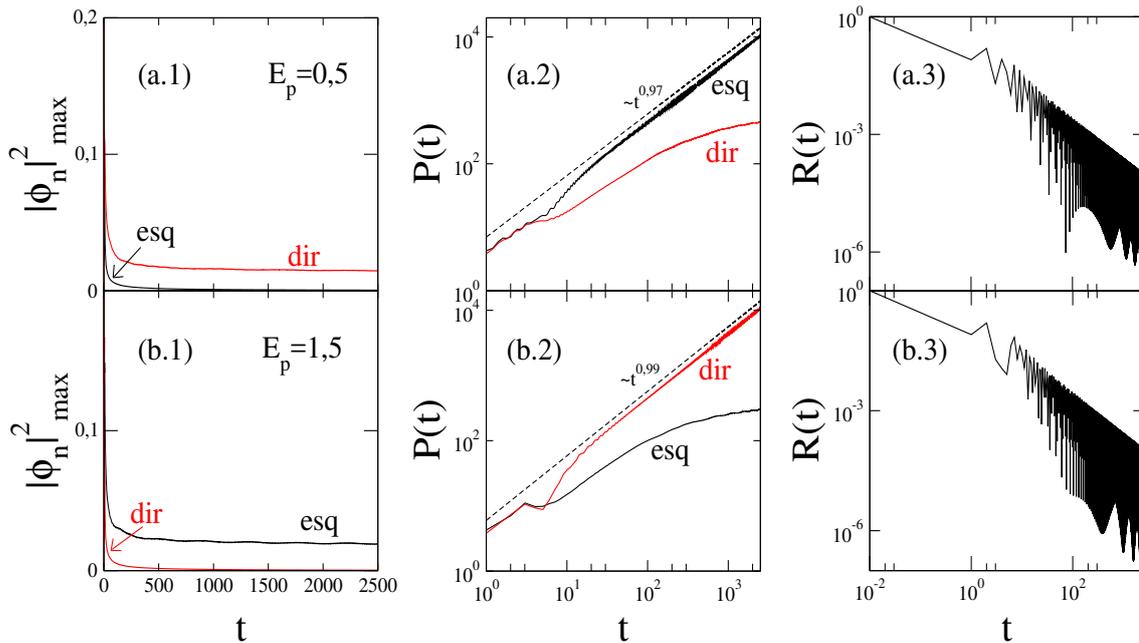
Fonte: Do autor, 2018.

Para uma descrição completa do comportamento da velocidade do nosso sistema, construímos um diagrama de fase da velocidade de grupo média no plano $E_p \times \chi$. Através da figura 28 é possível identificar para quais parâmetros o pacote de onda alcança sua velocidade máxima e quais as regiões em que o elétron possui velocidade nula. É interessante perceber que este resultado está de acordo com a descrição apresentada na figura 26. Ao nos aproximarmos dos pontos em que $\chi \approx 3,7$ para os campos $E_p = 0,5$ e $E_p = 1,5$ a partícula atinge sua velocidade máxima. Devido a existência mútua do campo elétrico pulsado e a interação elétron-fônon, a não-linearidade atua equilibrando a diferença de energias entre os sítios vizinhos, tornando-os assim dinamicamente degenerados e como o elétron tem tendência a se deslocar mais facilmente entre sítios com a mesma energia efetiva, temos a propagação do pacote de ondas entre os sítios vizinhos.

Fizemos algumas figuras para mostrarmos o comportamento de cada região. Escolhemos os campos com intensidades $E_p = 0,5$ e $1,5$. Poderíamos ter escolhido qualquer intensidade, no entanto optamos em trabalhar com os dois campos E_p em que o pacote de ondas atinge sua velocidade de grupo máxima. Na figura 29 mostramos o perfil da densidade de probabilidade $|\phi_n|^2$ de um pacote de ondas inicialmente localizado no centro de uma cadeia com $N = 4000$ sítios. Mantivemos a intensidade do acoplamento elétron-fônon constante em $\chi = 1,5$ para os três experimentos. Na figura 29 (a) temos o perfil da função de onda para o caso em que $E_p = 0,5$. Observamos a existência de um modo de estados auto-armadilhados que realiza um movimento unidirecional para a direita da cadeia, como previsto no diagrama da fig. 27. Quando o campo que atua sob a cadeia tem uma intensidade $E_p = 1,5$, temos uma inversão na direção de propagação dos estados auto-armadilhados. Podemos ver através da figura 29 (b), que o modo criado se propaga para a esquerda da cadeia.

Para averiguarmos se o apresentado tratava-se de um modo de estados auto-armadilhados

Figura 30 – Utilizamos uma cadeia cristalina com $N = 10^4$ sítios e ligamos o campo elétrico pulsado no instante $\tau = 3, 5$ (u.t.). A intensidade de acoplamento elétron-fônon foi mantida fixa em $\chi = 1, 5$ para todos os resultados. Dividimos a figura em *a* e *b* para as intensidades de campo elétrico pulsado $E_p = 0, 5$ e $1, 5$, respectivamente. Em (a.1), (b.1) temos a densidade de probabilidade máxima $|\phi_n|_{\max}^2$ de encontramos a partícula em um sítio n no tempo t . Em (a.2), (b.2) calculamos a função participação para o lado esquerdo (esq) e para o lado direito (dir) de n_0 . Já em (a.3), (b.3) temos a probabilidade de retorno no sítio inicial, ou seja, em $n_0 = N/2$.

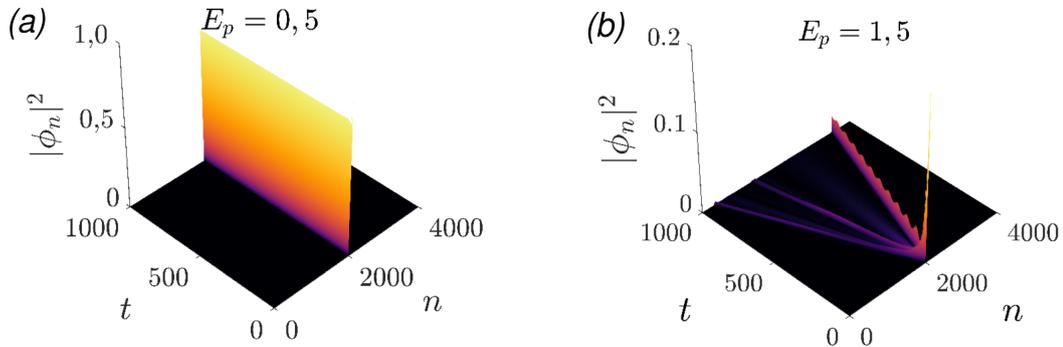


Fonte: Do autor, 2018.

ou se ao longo da evolução temporal o pacote de ondas se estendia, calculamos a densidade de probabilidade máxima $|\phi_n|_{\max}^2$. Se no limite assintótico $|\phi_n|_{\max}^2 \rightarrow 0$ significa que o pacote de ondas se dispersou pela cadeia, se esta quantidade apresentar um valor finito constante ao longo do tempo, temos estados auto-armadilhados. Além disso, calculamos a função participação $P(t) = 1/\sum_n |\phi_n|^4$. Essa quantidade nos informa o grau de localização da função de ondas, quanto mais próximo de um [$P(t) \approx 1$], mais localizado encontra-se o elétron. De modo que, quanto maior for o valor de $P(t)$ mais estendida encontra-se a função de onda sobre os sítios da cadeia. Por fim, não menos importante, calculamos a probabilidade de encontrarmos o elétron no sítio inicial da cadeia $R(t) = |\phi_{n_0}|^2$. Se $R(t)$ decresce ao longo da evolução temporal, significa que é muito pouco provável que encontremos o elétron no sítio inicial em algum instante de tempo. No entanto, quando $R(t)$ começa a retornar um valor finito e crescente, a chance de encontrarmos a função de onda no sítio inicial se torna mais provável. Como dito anteriormente, nossos resultados despreza todos os efeitos de borda, por conta disto, utilizamos uma cadeia com $N = 10000$ sítios nos dando assim uma evolução temporal até $t = 2500$ (u.t.) sem efeitos de borda.

A densidade de probabilidade máxima na figura 30 (a.1) nos mostra que para o lado

Figura 31 – Perfil da evolução temporal da densidade de probabilidade $|\phi_n|^2$ em uma cadeia com $N = 4000$ sítios e acoplamento elétron-fônon $\chi = 6$. Em (a) aplicamos um campo elétrico pulsado $E_p = 0,5$ e (b) $E_p = 1,5$.



Fonte: Do autor, 2018.

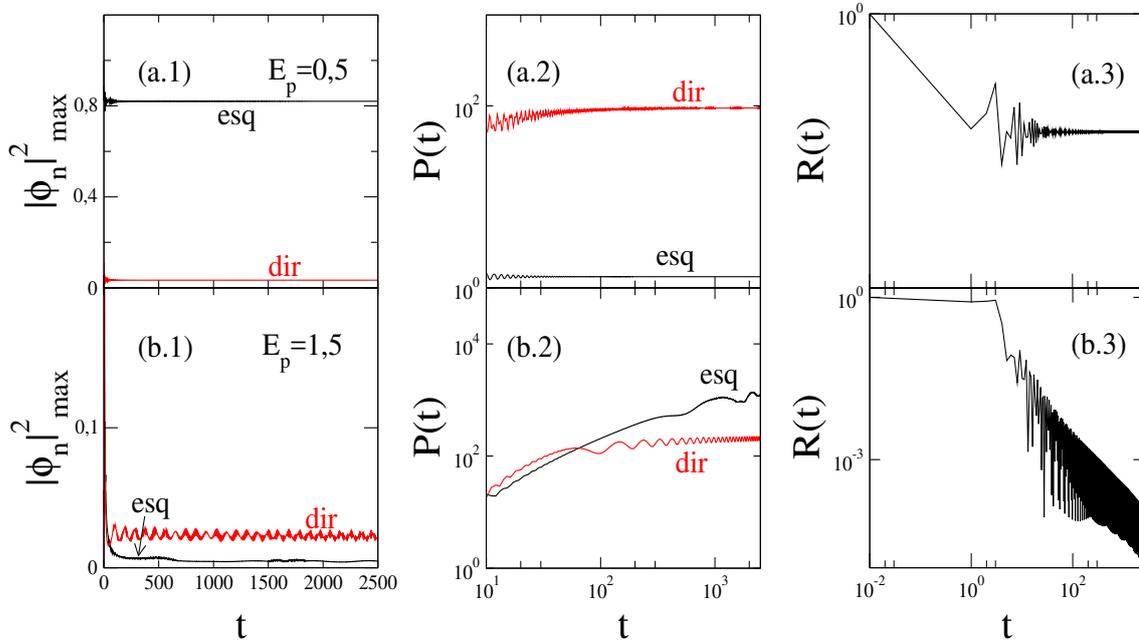
direito (dir) da cadeia, $|\phi_n|_{\max}^2$ se mantém em um valor finito e constante a medida que o tempo evolui. Enquanto que, no lado esquerdo $|\phi_n|_{\max}^2 \rightarrow 0$. Isso sugere a existência de estados auto-armadilhados bem definido se propagando para à direita, corroborando assim, os resultados apresentados na figura 29. A função participação na figura 30 (a.2) indica que enquanto o lado esquerdo apresenta um comportamento difusivo com $P(t) \propto t^{0,97}$, o lado direito sugere a existência de modos de amplitude finita que caminham pela rede. Este comportamento indica que o pacote de ondas não está em regime de auto-armadilhamento no sítio inicial temos a figura 30 (a.3), onde a probabilidade de retorno decai para zero muito rapidamente. Com isso, temos que todos os gráficos apresentados corroboram com a descrição mostrada no diagrama da figura 27.

Na figura 30 (b.1), é interessante observar que houve a inversão do lado em que a densidade de probabilidade máxima possuía valor finito. Agora temos que $|\phi_n|_{\max}^2$ mantém uma amplitude constante no lado esquerdo da cadeia, enquanto a densidade de probabilidade máxima no lado direito da cadeia vai à zero. Enquanto que em fig. (30) (b.2), a participação nos mostra que o pacote de ondas que se propaga balisticamente para o lado direito (dir) com $P(t) \propto t^{0,99}$.

Utilizando agora um parâmetro de acoplamento elétron-fônon com intensidade $\chi = 6,0$ temos que em algumas regiões do diagrama ocorre o auto-armadilhamento no sítio inicial n_0 enquanto que em outras regiões temos o regime indeterminado.

Na figura 31 (a) temos o perfil da densidade de probabilidade da função de onda $|\phi_n|^2$ quando $E_p = 0,5$. É interessante notarmos que o pacote de ondas quase que em sua totalidade encontra-se auto-armadilhado no sítio inicial. Podemos observar através das figuras 32 (a.1) e (a.2) que de fato grande parte do pacote de ondas está auto-aprisionado. Tanto a densidade de probabilidade máxima quanto a função participação nos retornam valores que corroboram com o apresentado. Um fato interessante a ser observado é que agora, neste caso, a probabilidade de retorno não decai e sim permanece em um valor finito, como podemos ver através da figura 32

Figura 32 – Mantemos $\chi = 6,0$ para todos os resultados. Dividimos a figura em *a* e *b* para as intensidades de campo elétrico pulsado $E_p = 0,5$ e $1,5$, respectivamente. Em (a.1), (b.1) temos a densidade de probabilidade máxima $|\phi_n|_{\max}^2$ de encontramos a partícula em um sítio n no tempo t . Em (a.2), (b.2) calculamos a função participação para o lado esquerdo (esq) e para o lado direito (dir) de n_0 . Já em (a.3), (b.3) temos a probabilidade de retorno no sítio inicial, ou seja, em $n_0 = N/2$.



Fonte: Do autor, 2018.

(a.3). Em outras palavras, para um forte acoplamento elétron-fônon a perturbação gerada pela interação entre o elétron e os fônons da cadeia é forte o suficiente para auto-armadilhar o pacote de ondas no sítio inicial. De modo que, é mais provável que encontremos o elétron no sítio n_0 do que em qualquer outro sítio da rede.

Para o caso com campo elétrico pulsado $E_p = 1,5$ o pacote de ondas apresenta três modos com estados auto-armadilhados móveis, como podemos ver através da figura 31 (b). O sistema apresenta esse comportamento dentro da região considerada indeterminada (ver diagrama da figura 27). Para que os auto-estados estivessem em um regime de auto-armadilhamento no sítio inicial, teríamos que calcular o resultados para $\chi > 10,0$ considerando $E_p = 1,5$. Todos os resultados apresentados estão de bom acordo com o diagrama de fase $\chi \times E_p$ da figura 27. Vimos que as densidades de probabilidade máxima, a função participação e as probabilidades de retorno apresentaram resultados satisfatórios, validando mais uma vez nossos resultados.

4.3 Conclusões

Nesse capítulo, tratamos de um sistema de partícula única em uma cadeia cristalina unidimensional não-linear sob a influência de um campo elétrico pulsado. Consideramos uma função de onda inicialmente localizada no centro da cadeia, aplicamos um único pulso elétrico e

acompanhamos sua evolução temporal. Utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem para resolver a equação de Schrödinger. Calculamos algumas quantidades típicas para esse tipo de sistema como: o centroide, a função participação, probabilidade e retorno e a densidade de probabilidade máxima da função de onda.

Nossos cálculos sugerem que a aplicação de um campo elétrico pulsado E_p em uma cadeia não-linear, é capaz de criar auto-estados armadilhados e promover uma transporte unidirecional. Além disso, o campo nos permite controlar a velocidade de propagação desses modos auto-armadilhados como também a direção desse movimento.

Através de um mapeamento numérico, foi possível identificarmos cinco regiões onde em cada uma delas o pacote de ondas apresentava uma dinâmica diferente. Classificamos as regiões como sendo: *I*, *II*, *III*, *IV* e *V*. Na região (*I*) o pacote de ondas se estende por toda a cadeia. Em (*II*) o conjunto campo elétrico e não-linearidade fraca já é capaz de criarmos modos auto-armadilhados que realizem um transporte unidirecional para a direita da cadeia. Enquanto que em (*III*) o movimento unidirecional é para a esquerda. Conseguimos descrever o movimento do elétron nessas duas regiões através da abordagem semi-clássica.

Na região (*IV*) encontramos um comportamento diferente. Nessa região, a dinâmica da partícula é caótica. De modo o que não foi possível caracterizar a direção do transporte unidirecional, pois o sistema apresenta uma sensibilidade a mudanças de parâmetros. Por fim a região (*V*) o pacote de ondas eletrônico apresenta um regime auto-armadilhado no sítio inicial n_0 . Para a caracterização de nossos resultados calculamos diversas quantidades físicas e todas apresentaram uma concordância com os fatos apresentados. Desta forma, conseguimos mapear para quais parâmetros possuímos o controle coerente do pacote de ondas em uma cadeia.

5 Considerações Finais

Essa dissertação de mestrado teve como objetivo investigar a dinâmica eletrônica de sistemas unidimensionais sob a ação de campos externos, em especial, campo elétrico pulsado.

Começamos (no Capítulo 2) estudando um sistema simples onde modelamos o pacote de ondas de um elétron disposto em uma cadeia cristalina unidimensional com N íons e buscamos entender quais eram os efeitos de aplicarmos um campo elétrico pulsado sobre esse sistema. Mostramos que ao aplicarmos um campo pulsado o pacote de ondas realizava um movimento unidirecional ao longo da cadeia. Mostramos que regulando a intensidade do campo elétrico através do parâmetro $\beta(\rho)$ é possível controlar toda dinâmica do elétron nesse sistema, desde a direção de propagação do pacote de ondas como também a sua velocidade de grupo. Todos os resultados numéricos foram validados através da descrição semi-clássica, mostrando assim um excelente acordo entre nossos resultados e a abordagem semi-clássica. Com o rápido desenvolvimento tecnológico e grandes experimentos que vem sendo realizados através de condensados de Bose-Einstein, redes ópticas e outras plataformas, enfatizamos que nossos resultados apresenta-se como uma alternativa interessante no contexto de manipulação de partículas carregadas em sistemas de baixa dimensionalidade

No Capítulo 3 descrevemos a dinâmica de duas partículas correlacionadas, através da interação elétron-elétron, em uma cadeia unidimensional 1d sob ação de um campo elétrico pulsado dependente do tempo. Apresentamos uma ferramenta para gerar e manipular espacialmente estados emaranhados de duas partículas. Com a utilização de um campo externo pulsado conseguimos mostrar que estados ligados e estados não-ligados de um pacote de ondas inicialmente emaranhado podem ser controlados separadamente. Ajustando o parâmetro $\beta(\rho)$, mostramos que é possível fazer com que os estados ligados e não ligados caminhem para a mesma direção ou em direções opostas. A amplitude de cada modo está relacionada ao grau de emaranhamento dos dois elétrons, que apresenta uma dependência não monotônica com a interação elétron-elétron. Esse comportamento vem do caráter competitivo entre a banda de estados ligados e a banda de estados não-ligados.

Por fim, no Capítulo 4, estudamos um sistema de partícula única em uma cadeia cristalina unidimensional não-linear sob a ação de um campo elétrico suave. Mostramos que devido ao conjunto campo elétrico pulsado E_p com a não-linearidade existente na cadeia devido aos seus modos vibracionais é possível criarmos um movimento unidirecional de auto-estados armadilhados ao longo da cadeia. As singularidades do campo nos permite controlar a velocidade de propagação desses modos como também a direção desse movimento. Para uma compreensão completa do nosso sistema construímos um mapeamento numérico, de modo que identificamos cinco regiões onde em cada uma delas o pacote de ondas apresentava uma dinâmica diferente. Classificamos as regiões como sendo: *I*, *II*, *III*, *IV* e *V*. Na região (*I*) todos os estados são degenerados, ou

seja, o pacote de ondas se estende por toda a cadeia unidimensional. Em (II) o conjunto campo elétrico e não-linearidade fraca já é capaz de criarmos modos auto-armadilhados que realizem um transporte unidirecional para a direita da cadeia. Enquanto que em (III) o movimento unidirecional é para a esquerda. Conseguimos descrever o movimento do elétron nessas duas regiões através da abordagem semi-clássica. Na região (IV) encontramos um comportamento diferente. Nessa região, a dinâmica da partícula é inconstante. De modo que não foi possível caracterizar a direção do transporte unidirecional, pois o sistema apresenta uma sensibilidade a mudanças de parâmetros. Por fim a região (V) o pacote de ondas eletrônico apresenta um regime auto-armadilhado no sítio inicial n_0 .

Em suma, os resultados obtidos permitiram uma melhor compreensão de diversos sistemas e fenômenos associados a dinâmica eletrônica em sistemas unidimensionais. Esperamos que os trabalhos desenvolvidos nesse trabalho de mestrado incentivem futuras investigações de forma que venha a contribuir para o melhor entendimento de transporte unidirecional sob ação de campo pulsado.

Referências

AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Physical Review A*, APS, v. 48, n. 2, p. 1687, 1993. Citado na página 44.

ANDERSON, B. P.; KASEVICH, M. A. Macroscopic quantum interference from atomic tunnel arrays. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 282, n. 5394, p. 1686–1689, 1998. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/282/5394/1686>>. Citado na página 23.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. Solid state. *Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston)*, 1976. Citado na página 19.

AYCOCK, L. M. et al. Brownian motion of solitons in a bose–einstein condensate. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 114, n. 10, p. 2503–2508, 2017. Citado na página 59.

BASSALO, J. *A Crônica da Física do Estado Sólido III. Teoria de Bandas*. 1994. 63–75 p. Citado na página 15.

BASSALO, J. M. F. *A crônica da Física do Estado Sólido: II. Teoria dos Metais*. 1993. Citado na página 15.

BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, v. 52, n. 7, p. 555–600, Jul 1929. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01339455>>. Citado na página 16.

BOER, J. H. de; VERWEY, E. J. Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands. *Proceedings of the Physical Society*, IOP Publishing, v. 49, n. 4S, p. 59, 1937. Citado na página 16.

BRITO, P. D.; RODRIGUES, E.; NAZARENO, H. Two interacting electrons in one-dimensional deterministic aperiodic systems: Fibonacci and thue-morse lattices. *Physical Review B*, APS, v. 73, n. 1, p. 014301, 2006. Citado na página 45.

BRITO, P. de; RODRIGUES, E.; NAZARENO, H. Dynamics of two interacting electrons in a one-dimensional crystal with impurities. *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier, v. 388, n. 1-2, p. 393–403, 2007. Citado na página 45.

BRITO, W. H. et al. Metal-insulator transition in VO_2 : A DFT + DMFT perspective. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 117, p. 056402, Jul 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.117.056402>>. Citado na página 26.

BUARQUE, A.; DIAS, W. Unidirectional quantum walk of two correlated particles: Manipulating bound-pair and unbound wave-packet components. *Physics Letters A*, v. 381, n. 37, p. 3173 – 3177, 2017. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960117307417>>. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 57.

CAETANO, R.; LYRA, M. Wave packet dynamics under superposed dc and ac fields: Super bloch oscillations, resonant directed motion and delocalization. *Physics Letters A*, v. 375, n. 28, p. 2770 – 2774, 2011. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960111006955>>. Citado na página 31.

CAETANO, R. A.; LYRA, M. L. Wave packet dynamics under superposed DC and AC fields: Super Bloch oscillations, resonant directed motion and delocalization. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, Elsevier B.V., v. 375, n. 28-29, p. 2770–2774, 2011. ISSN 03759601. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2011.06.002>>. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 64.

CHAKRABORTY, S. et al. Spatial search by quantum walk is optimal for almost all graphs. *Physical review letters*, APS, v. 116, n. 10, p. 100501, 2016. Citado na página 44.

CHEN, W.; MILLS, D. Gap solitons and the nonlinear optical response of superlattices. *Physical review letters*, APS, v. 58, n. 2, p. 160, 1987. Citado na página 59.

CHOI, D.-I.; NIU, Q. Bose-einstein condensates in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 82, p. 2022–2025, Mar 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.2022>>. Citado na página 23.

CLARO, F.; WEISZ, J.; CURILEF, S. Interaction-induced oscillations in correlated electron transport. *Physical Review B*, APS, v. 67, n. 19, p. 193101, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 53.

CORRIELLI, G. et al. Fractional bloch oscillations in photonic lattices. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 4, p. 1555, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.

DAHAN, M. B. et al. Bloch oscillations of atoms in an optical potential. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 76, p. 4508–4511, Jun 1996. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.4508>>. Citado na página 23.

DATTA, P.; JAYANNAVAR, A. Effect of nonlinearity on the dynamics of a particle in field-induced systems. *Physical Review B*, APS, v. 58, n. 13, p. 8170, 1998. Citado na página 28.

DATTA, P.; JAYANNAVAR, A. Effect of nonlinearity on the dynamics of a particle in field-induced systems. *Physical Review B*, v. 58, n. 13, p. 8170–8173, 1998. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.8170>>. Citado na página 67.

DATTA, P.; KUNDU, K. Time evolution of models described by a one-dimensional discrete nonlinear schrödinger equation. *Physical Review B*, APS, v. 53, n. 22, p. 14929, 1996. Citado na página 28.

DI, B. et al. Formation and evolution dynamics of bipolarons in conjugated polymers. *The Journal of Physical Chemistry B*, ACS Publications, v. 115, n. 5, p. 964–971, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 59, 60, 61 e 63.

DIAS, W.; LYRA, M.; MOURA, F. D. The role of hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 374, n. 44, p. 4554–4558, 2010. Citado na página 45.

DIAS, W.; LYRA, M.; MOURA, F. de. The role of Hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons. *Physics Letters A*, v. 374, n. 44, p. 4554–4558, 2010. ISSN 03759601. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S037596011001145X>>. Citado na página 43.

DIAS, W. et al. Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field. *Physical Review B*, v. 76, n. 15, p. 155124, 2007. ISSN 1098-0121. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.155124>>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 53.

DIAS, W. et al. Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field. *Physical Review B*, APS, v. 76, n. 15, p. 155124, 2007. Citado na página 45.

DIAS, W. S.; De Moura, F. A.; LYRA, M. L. Quantum entanglement and drifting generated by an ac field resonant with frequency-doubled Bloch oscillations of correlated particles. *Physical Review A*, v. 93, n. 2, p. 1–5, 2016. ISSN 24699934. Citado na página 43.

DIRAC, P. A. M. On the theory of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 112, n. 762, p. 661–677, 1926. ISSN 0950-1207. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/112/762/661>>. Citado na página 15.

DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Beyond the semiclassical description of Bloch oscillations. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 31, n. 3, p. 639, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 64.

DRUDE, P. Zur elektronentheorie der metalle. *Annalen der Physik*, WILEY-VCH Verlag, v. 306, n. 3, p. 566–613, 1900. ISSN 1521-3889. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/andp.19003060312>>. Citado na página 15.

DUNLAP, D. H.; KENKRE, V. M. Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 34, p. 3625–3633, Sep 1986. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.3625>>. Citado na página 22.

ECKARDT, A. et al. Exploring dynamic localization with a Bose-Einstein condensate. *Physical Review A*, APS, v. 79, n. 1, p. 013611, 2009. Citado na página 23.

EZAWA, M. Skyrmion burst and multiple quantum walk in thin ferromagnetic films. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 375, n. 41, p. 3610–3614, 2011. Citado na página 44.

FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. *Physical Review A*, APS, v. 58, n. 2, p. 915, 1998. Citado na página 44.

FELDMANN, J. et al. Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Physical Review B*, v. 46, n. 11, p. 7252–7255, 1992. ISSN 01631829. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 23.

FERMI, E. Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico. *Rend. Lincei*, v. 3, n. 1, p. 145–149, 1926. Citado na página 15.

FU, J.-y. et al. Dynamics of charge injection into an open conjugated polymer: A nonadiabatic approach. *Physical Review B*, APS, v. 73, n. 19, p. 195401, 2006. Citado na página 59.

FU, R.-l.; GUO, G.-y.; SUN, X. Effects of the electric field on the self-trapping excited states in conjugated polymers. *Physical Review B*, APS, v. 62, n. 23, p. 15735, 2000. Citado na página 61.

HALLER, E. et al. Inducing transport in a dissipation-free lattice with super bloch oscillations. *Physical Review Letters*, v. 104, n. 20, p. 1–4, 2010. ISSN 00319007. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.

HALLER, E. et al. Inducing transport in a dissipation-free lattice with super bloch oscillations. *Physical review letters*, APS, v. 104, n. 20, p. 200403, 2010. Citado na página 31.

HARTMANN, T. et al. Dynamics of bloch oscillations. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 6, n. 1, p. 2, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 19, 64 e 90.

HODDESON, L.; BAYM, G.; ECKERT, M. The development of the quantum-mechanical electron theory of metals: 1928. *Reviews of Modern Physics*, v. 59, n. 1, p. 287–327, 1987. ISSN 00346861. Citado na página 15.

HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part i. the molecular-crystal model. *Annals of physics*, Elsevier, v. 8, n. 3, p. 325–342, 1959. Citado na página 26.

HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part ii. the “small” polaron. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 8, n. 3, p. 343–389, 1959. Citado na página 26.

HOLTHAUS, M. Coherent control of quantum localization. *Coherent Control in Atoms, Molecules, and Semiconductors*, Springer Netherlands, p. 171–182, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.

HONG-XIA, Z. et al. Electron correlation effects in polaron-pair recombination in conjugated polymers. *Chinese Physics Letters*, IOP Publishing, v. 32, n. 4, p. 047201, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 59, 60 e 63.

IVANOV, V. V. et al. Coherent delocalization of atomic wave packets in driven lattice potentials. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 100, p. 043602, Jan 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.043602>>. Citado na página 43.

JOAS, C. Campos que interagem: física quântica e a transferência de conceitos entre física de partículas, nuclear e do estado sólido. *Teoria quântica: estudos históricos e implicações culturais. Campina Grande: Editora da Universidade Estadual da Paraíba/Livraria da Física*, p. 107–49, 2010. Citado na página 15.

JOHANSSON, Å.; STAFSTRÖM, S. Polaron dynamics in a system of coupled conjugated polymer chains. *Physical review letters*, APS, v. 86, n. 16, p. 3602, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 59, 60 e 63.

JUNIOR, L. A. R.; BRITO, S. S. de; NETO, P. H. de O. Trap-assisted charge transport at conjugated polymer interfaces. *Chemical Physics Letters*, Elsevier, v. 644, p. 121–126, 2016. Citado na página 61.

KENKRE, V.; CAMPBELL, D. Self-trapping on a dimer: time-dependent solutions of a discrete nonlinear schrödinger equation. *Physical Review B*, APS, v. 34, n. 7, p. 4959, 1986. Citado na página 26.

- KUDO, K.; MONTEIRO, T. Theoretical analysis of super-bloch oscillations. *Physical Review A*, APS, v. 83, n. 5, p. 053627, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.
- LEBLOND, H.; KREMER, D.; MIHALACHE, D. Few-cycle spatiotemporal optical solitons in waveguide arrays. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 95, p. 043839, Apr 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.95.043839>>. Citado na página 59.
- LEO, K. Interband optical investigation of bloch oscillations in semiconductor superlattices. *Semiconductor Science and Technology*, v. 13, n. 3, p. 249, 1998. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0268-1242/13/i=3/a=003>>. Citado na página 23.
- LEO, K. et al. Observation of bloch oscillations in a semiconductor superlattice. *Solid State Communications*, v. 84, n. 10, p. 943 – 946, 1992. ISSN 0038-1098. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003810989290798E>>. Citado na página 23.
- LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 20, p. 1445–1448, Jun 1968. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.20.1445>>. Citado na página 25.
- LONGHI, S. Photonic bloch oscillations of correlated particles. *Optics letters*, Optical Society of America, v. 36, n. 16, p. 3248–3250, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 53.
- LONGHI, S.; JANNER, D. Self-focusing and nonlinear periodic beams in parabolic index optical fibres. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, IOP Publishing, v. 6, n. 5, p. S303, 2004. Citado na página 59.
- LONGHI, S.; VALLE, G. D. Anyonic bloch oscillations. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 85, p. 165144, Apr 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.165144>>. Citado na página 43.
- LONGHI, S.; VALLE, G. D. Correlated super-bloch oscillations. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 86, p. 075143, Aug 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.075143>>. Citado na página 43.
- LYSSENKO, V. G. et al. Direct measurement of the spatial displacement of bloch-oscillating electrons in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 79, p. 301–304, Jul 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.301>>. Citado na página 23.
- MA, H.; SCHOLLWÖCK, U. Dynamical simulations of charged soliton transport in conjugated polymers with the inclusion of electron-electron interactions. *The Journal of chemical physics*, AIP, v. 129, n. 24, p. 244705, 2008. Citado na página 59.
- MOHSENI, M. et al. Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer. *The Journal of chemical physics*, AIP, v. 129, n. 17, p. 11B603, 2008. Citado na página 44.
- MOLINA, M.; TSIRONIS, G. Disorder in the discrete nonlinear schrödinger equation. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 9, n. 16, p. 1899–1932, 1995. Citado na página 28.
- MORSCH, O. et al. Bloch oscillations and mean-field effects of bose-einstein condensates in 1d optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 87, p. 140402, Sep 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.140402>>. Citado na página 23.

MOTT, N. Metal-insulator transition. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 40, n. 4, p. 677, 1968. Citado na página 16.

MOURA, F. D.; CAETANO, R.; SANTOS, B. Dynamics of one electron in a nonlinear disordered chain. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 24, n. 24, p. 245401, 2012. Citado na página 28.

MÜLLER-GROELING, A.; WEIDENMÜLLER, H.; LEWENKOPF, C. Interacting electrons in mesoscopic rings. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 22, n. 3, p. 193, 1993. Citado na página 26.

NETO, A. R.; MOURA, F. de. Electronic dynamics under effect of a nonlinear morse interaction and a static electric field. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 40, p. 6–14, 2016. Citado na página 29.

PEIK, E. et al. Bloch oscillations of atoms, adiabatic rapid passage, and monokinetic atomic beams. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 55, p. 2989–3001, Apr 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.55.2989>>. Citado na página 23.

PEIXOTO, A.; DIAS, W. The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 242, p. 68–73, 2016. Citado na página 53.

PEIXOTO, A. et al. Wavepacket dynamics of coupled particles in aperiodic chains: Weakening of anderson localization and local field effects. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 395, p. 22–30, 2014. Citado na página 43.

PERETS, H. B. et al. Realization of quantum walks with negligible decoherence in waveguide lattices. *Physical review letters*, APS, v. 100, n. 17, p. 170506, 2008. Citado na página 44.

PERUZZO, A. et al. Quantum walks of correlated photons. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 329, n. 5998, p. 1500–1503, 2010. Citado na página 44.

PORTUGAL, R. *Quantum walks and search algorithms*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. Citado na página 44.

PREISS, P. M. et al. Strongly correlated quantum walks in optical lattices. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 347, n. 6227, p. 1229–1233, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 58.

SCHMITZ, H. et al. Quantum walk of a trapped ion in phase space. *Physical review letters*, APS, v. 103, n. 9, p. 090504, 2009. Citado na página 44.

SCOTT, A. Davydov's soliton. *Physics Reports*, Elsevier, v. 217, n. 1, p. 1–67, 1992. Citado na página 59.

SHEPELYANSKY, D. L. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 73, p. 2607–2610, Nov 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.2607>>. Citado na página 26.

SONG, Z.; SUN, C. P. Quantum information storage and state transfer based on spin systems. *Low Temperature Physics*, v. 31, n. 8, p. 686–694, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2008129>>. Citado na página 30.

- SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R.; HEEGER, A. J. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 42, p. 1698–1701, Jun 1979. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.42.1698>>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 59.
- SUN, Z.; STAFSTRÖM, S. Spin-dependent polaron recombination in conjugated polymers. *The Journal of chemical physics*, AIP, v. 136, n. 24, p. 244901, 2012. Citado na página 60.
- THOMMEN, Q.; GARREAU, J. C.; ZEHLÉ, V. Theoretical analysis of quantum dynamics in one-dimensional lattices: Wannier-stark description. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 65, p. 053406, Apr 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.65.053406>>. Citado na página 43.
- VELARDE, M. G. From polaron to soliton: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport. *Journal of computational and applied mathematics*, Elsevier, v. 233, n. 6, p. 1432–1445, 2010. Citado na página 29.
- VERWEY, E. J. W.; BOER, J. H. de. Dilatancy. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas*, WILEY-VCH Verlag, v. 57, n. 4, p. 383–389, 1938. ISSN 0165-0513. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/recl.19380570403>>. Citado na página 24.
- WANG, Q.; LI, Z.-J. Repelling, binding, and oscillating of two-particle discrete-time quantum walks. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 373, p. 1–9, 2016. Citado na página 44.
- WEISZ, J.; CLARO, F. Pair formation in two-electron correlated chains. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 15, n. 19, p. 3213, 2003. Citado na página 53.
- WU, C.-Q. et al. Dynamical study on polaron formation in a metal/polymer/metal structure. *Physical Review B*, APS, v. 68, n. 12, p. 125416, 2003. Citado na página 61.
- YAMADA, H.; IGUCHI, K. Some effective tight-binding models for electrons in dna conduction: A review. *Advances in Condensed Matter Physics*, Hindawi, v. 2010, 2010. Citado na página 59.
- YANG, F. et al. Migration of an exciton in organic polymers driven by a nonuniform internal electric field. *Organic Electronics*, Elsevier, v. 30, p. 171–175, 2016. Citado na página 61.
- ZALLEN, R. Localization delocalization transitions. In: _____. *The Physics of Amorphous Solids*. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2007. p. 205–251. ISBN 9783527617968. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/9783527617968.ch5>>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- ZHANG, Z.; KANG, J.; LI, R. Wave packet dynamics in uniform chain with various spatial distributions of nonlinearity. *DEStech Transactions on Engineering and Technology Research*, n. apetc, 2017. Citado na página 28.

Apêndices

APÊNDICE A – Campo Elétrico e Oscilações de Bloch

Quando temos uma partícula sob a ação de um campo elétrico externo em uma cadeia unidimensional com potencial periódico $V(x) = V(x + a)$, o Hamiltoniano é dado pela equação

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + eFx \quad (\text{A.1})$$

sendo p o momento da partícula, m a massa da mesma e F o módulo do campo externo aplicado, e é a carga da partícula e a é um parâmetro de rede (ver figura 1). A dinâmica da função de onda associada a partícula apresenta um comportamento não intuitivo, realizando oscilações coerentes bem definidas conhecidas na literatura como Oscilações de Bloch.

Escrevendo a equação (A.1) na aproximação de ligação forte (*tight-binding*) temos

$$H = -J \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + \sum_n eFan|n\rangle\langle n| \quad (\text{A.2})$$

onde J representa a energia de transferência do sítio n para o sítio $n+1$ ou $n-1$, eFn representa o termo discreto da energia associada ao campo externo. Escrevendo o hamiltoniano na sua forma matricial, multiplicando ambos os lados de H pelos estados de momento, $|k\rangle$ e $|k'\rangle$. (A.2) por $\langle k|$ de modo que

$$\langle k|H|k'\rangle = -J \sum_n (\underbrace{\langle k|n\rangle\langle n+1|k'\rangle}_A + \underbrace{\langle k|n+1\rangle\langle n|k'\rangle}_B) + \sum_n eFan \underbrace{\langle k|n\rangle\langle n|k'\rangle}_C \quad (\text{A.3})$$

Como visto no Capítulo 1, podemos expressar os estados do momento $|k\rangle$ em termos de estados de Wannier

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \sum_n e^{ikna} |n\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Substituindo a equação (A.4) na equação (A.3) temos que em A

$$\begin{aligned} A = \langle k|n\rangle\langle n+1|k'\rangle &= \left(\sqrt{\frac{a}{2\pi}}\right)^2 \sum_n e^{-ikna} \langle n|n\rangle \sum_{n'} e^{ik'n'a} \langle n+1|n'\rangle \\ &= \frac{a}{2\pi} e^{-ikna} \sum_{n'} e^{ik'n'a} \delta_{n+1,n'} \\ &= \frac{a}{2\pi} e^{-ikna} e^{ik'(n+1)a} \\ &= \frac{a}{2\pi} e^{ika} e^{in(k'-k)a} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Para resolvermos B utilizamos o mesmo

$$\begin{aligned}
 B = \langle k|n+1\rangle\langle n|k'\rangle &= \left(\sqrt{\frac{a}{2\pi}}\right)^2 \sum_n e^{-ikna} \langle n|n+1\rangle \sum_{n'} e^{ik'n'a} \langle n|n'\rangle \\
 &= \frac{a}{2\pi} \sum_n e^{-ikna} \delta_{n,n+1} e^{ik'na} \\
 &= \frac{a}{2\pi} e^{-ik(n+1)a} e^{ik'na} \\
 &= \frac{a}{2\pi} e^{-ika} e^{in(k'-k)a}
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Em C temos

$$C = n\langle k|n\rangle\langle n|k'\rangle = \frac{na}{2\pi} e^{in(k'-k)a} \tag{A.7}$$

Substituindo estes resultados na equação (A.3)

$$\begin{aligned}
 \langle k|H|k'\rangle &= -J \left(\sum_n \frac{a}{2\pi} e^{ika} e^{in(k'-k)a} + \sum_n \frac{a}{2\pi} e^{-ika} e^{in(k'-k)a} \right) + \frac{ea^2}{2\pi} \sum_n n e^{in(k'-k)a} \\
 &= -Ja \delta_{k',k} \underbrace{(e^{ik'a} + e^{-ika})}_D + ieFa \delta_{k',k} \frac{d}{dk'} \\
 &= a \delta_{k,k'} H(k)
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

utilizando a relação de Euler e que \hat{x} no espaço dos momentos é $\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp} = i \frac{d}{dk}$, podemos escrever o hamiltoniano $H(k)$ como

$$H(k) = -2J \cos(ka) + eF\hat{x}, \tag{A.9}$$

os autoestados da equação (A.9) são obtidos através da resolução da equação de Schrödinger $H(k)|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$. De modo que,

$$H(k)|\Psi\rangle = -2J \cos(ka)\Psi(k) + ieF \frac{d}{dk} \Psi(k) = E\Psi(k), \tag{A.10}$$

resolvendo esta última através do método de separação de variáveis e impondo que a normalização da função de onda permaneça dentro da primeira zona de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$ chegamos a

$$\Psi(k) = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \exp \left[-\frac{i}{eF} \left(Ek + \frac{2J}{a} \text{sen}(ka) \right) \right]. \tag{A.11}$$

Devido ao fato de k ser reduzido à primeira zona de Brillouin, os autovalores de energia são $E_m = mF ea$ com $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$. De modo que, substituindo as autoenergias na equação (A.11), os autoestados ficam com a seguinte forma

$$\Psi_m(k) = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \exp \left[-i \left(mak + \frac{2J}{eaF} \text{sen}(ka) \right) \right]. \tag{A.12}$$

com $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$. Escrevendo (A.12) em termos dos estados de Wannier segue que,

$$\begin{aligned}
 \Psi_m(n) = \langle n | \Psi_m \rangle &= \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \langle n | k \rangle \langle k | \Psi_m \rangle dk \\
 &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \exp \left[-i \left(mak + \frac{2J}{eaF} \text{sen}(ka) \right) \right] \sum_{n'} e^{ikan'} \langle n | n' \rangle dk \\
 &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \exp \left[-i \left(eka(m-n) + \frac{2J}{eaF} \text{sen}(ka) \right) \right] dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{\pi}^{-\pi} \exp \left[-i \left(x(n-m) - \frac{2J}{eaF} \text{sen}(ka) \right) \right] dx \\
 &= J_{n-m}(\gamma)
 \end{aligned} \tag{A.13}$$

onde $J_l(x)$ é a função de Bessel de ordem l , e $\gamma = 2J/eaF$. Representando o propagador temporal na base de Wannier, podemos escrever que

$$K_{nn'}(t) = \langle n | U(t) | n' \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle n | \Psi_l \rangle e^{-ilEt/\hbar} \langle \Psi_l | n' \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_{n-l}(\gamma) e^{-ilEt/\hbar} J_{n'-l}(\gamma) \tag{A.14}$$

O teorema de adição para as funções de Bessel de ordem inteira nos diz que

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(z) J_{k-p}(z) e^{ikx} = J_p(2z \text{sen}(x/2)) e^{ip(\pi-x)/2} \tag{A.15}$$

o que nos leva a

$$K_{nn'}(t) = J_{n-n'} \left[2\gamma \text{sen} \left(\frac{eaFt}{2\hbar} \right) \right] e^{\frac{i}{2}(n-n')(\pi - \frac{eaF}{\hbar}t)} e^{in' \frac{eaF}{\hbar}t} \tag{A.16}$$

Na literatura encontramos duas condições iniciais bastante interessantes. Na primeira condição a função de onda é caracterizada por estar concentrada em um único sítio da rede, n_0 , conhecida também como uma função do tipo delta. Enquanto que na segunda condição consideramos que a função de onda é uma gaussiana centrada no sítio n_0 . A dinâmica do sistema é dada pela evolução temporal da função de onda $|\Psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |n\rangle$, onde ψ_n são amplitudes de Wannier e representa a probabilidade de encontrarmos a partícula no sítios n .

Realizando a evolução temporal para o primeiro caso onde, $\psi_n(t=0) = \delta_{n,n_0}$, a evolução temporal é dada através do operador evolução temporal

$$\begin{aligned}
 \psi_n(t) = \langle n | \Psi(t) \rangle &= \langle n | e^{-iHt/\hbar} | \Psi(0) \rangle \\
 &= \langle n | e^{-iHt/\hbar} \left(\sum_m |\Psi_m\rangle \langle \Psi_m| \right) | \Psi(0) \rangle \\
 &= \sum_m \langle n | \Psi_m \rangle e^{-iE_m t/\hbar} \langle \Psi_m | \Psi_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n \psi_n(0)|n\rangle = \sum_n \delta_{n,0}|n\rangle = |0\rangle \quad (\text{A.18})$$

utilizando a equação (A.16) temos que

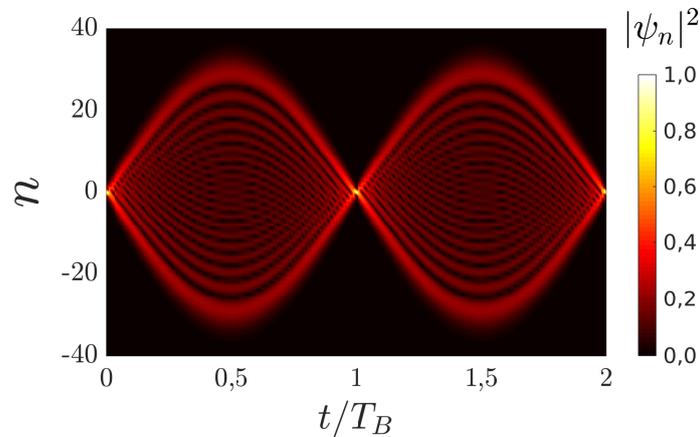
$$\begin{aligned} \psi_n(t) &= \sum_m \langle m|\Psi_m\rangle \exp\left(-\frac{iE_m t}{\hbar}\right) \langle \Psi_m|0\rangle = K_{n0} = \\ &= J_n \left[2\gamma \text{sen}\left(\frac{eaFt}{2\hbar}\right) \right] \exp\left[\frac{i}{2}n\left(\pi - \frac{eaF}{\hbar}t\right)\right]. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

O primeiro termo que multiplica J_n no resultado da eq. (A.19) nos informa a região da rede em que o pacote de onda estará realizando o movimento conhecido como respiração (*breathing*), ou seja, um movimento periódico em que o pacote de ondas alarga e se estreita com período de Bloch $T_B = 2\pi\hbar/eFa$. Ou seja,

$$|n| < \left| 2\gamma \text{sen}\left(\frac{2eaFt}{2\hbar}\right) \right|. \quad (\text{A.20})$$

Podemos ver através da figura 33

Figura 33 – Evolução temporal da densidade de probabilidade de pacote de ondas inicialmente tipo delta



Fonte: Do autor, 2017

Para a condição inicial em que a função de onda é dada por uma distribuição gaussiana centrada inicialmente no sítio n_0 , temos

$$\psi_n(t=0) = B(\sigma) \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{4\sigma^2}\right) \quad (\text{A.21})$$

onde $B(\sigma)$ é uma constante de normalização e σ representa a largura da pacote de onda, conhecido como desvio padrão da distribuição. Se considerarmos que $\sigma^2 \gg a^2$, a evolução temporal das amplitudes de Wannier pode ser aproximada por

$$\psi_n(t) = B(\sigma) \exp\left(-i\Phi(t) - i\frac{(n-n_0)eaFt}{\hbar} - \frac{a^2}{4\sigma^2}[(n-n_0) - n(t)]^2\right) \quad (\text{A.22})$$

novamente $\Phi(t)$ representa uma fase dinâmica dada por

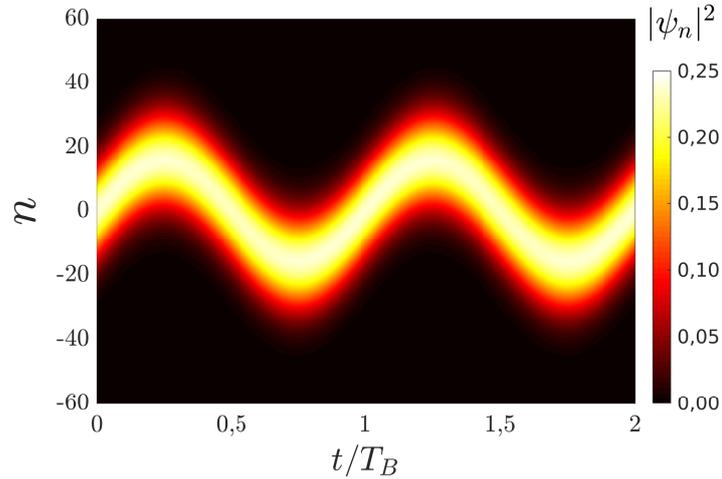
$$\Phi(t) = -2\gamma \text{sen} \left(\frac{eF a t}{2\hbar} \right) \quad (\text{A.23})$$

$$\cos \left(\frac{eF a t}{2\hbar} \right) \quad (\text{A.24})$$

e $n(t)$ é o centro da distribuição que realiza oscilações coerentes com frequência de Bloch ω_B dado pela expressão

$$n(t) = -2\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{e a F t}{2\hbar} \right) \quad (\text{A.25})$$

Figura 34 – Evolução temporal da densidade de probabilidade para um pacote de ondas inicialmente gaussiano.



Fonte: Do autor, 2017

A.1 Valores esperados de posição

Podemos analisar o comportamento dos valores esperados para a posição e para o momento da função de onda na evolução temporal, bem como dependência temporal dos valores esperados para a posição e para o momento da função de onda, temos que o Hamiltoniano *tight-binding*

$$\hat{H} = -2J \cos(\hat{k}a) + eF\hat{x} \quad (\text{A.26})$$

sendo \hat{k} e \hat{x} operadores unitários que satisfazem a relação de comutação $[\hat{x}, \hat{k}] = i$.

$$\begin{aligned}\hat{K} &= e^{-i\hat{k}a} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\langle n+1| \\ \hat{K}^\dagger &= e^{i\hat{k}a} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n+1\rangle\langle n| \\ \hat{N} &= \frac{\hat{x}}{a} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n|n\rangle\langle n|\end{aligned}\quad (\text{A.27})$$

de modo que, $\hat{K}|n\rangle = |n-1\rangle$, $\hat{K}^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle$ e $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$. As relações de comutação são satisfeitas: $[\hat{K}, \hat{N}] = \hat{K}$, $[\hat{K}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{K}^\dagger$ e $[\hat{K}, \hat{K}^\dagger] = 0$. Podemos escrever o Hamiltoniano da equação (A.26) em termos das definições (A.27)

$$\hat{H} = -J(e^{-i\hat{k}a} + e^{i\hat{k}a}) + eF\hat{x} = -J(\hat{K} + \hat{K}^\dagger) + eaF\hat{N}. \quad (\text{A.28})$$

A evolução temporal dos operadores \hat{N} e \hat{K} é realizada utilizando o formalismo de Heisenberg,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{K}(t) &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{K}(t)] \\ &= \frac{i}{\hbar} [-J(\hat{K} + \hat{K}^\dagger) + eaF\hat{N}, \hat{K}] = \frac{ieFa}{\hbar} [\hat{N}, \hat{K}] \\ &= -\frac{ieaF}{\hbar}\hat{K}(t)\end{aligned}\quad (\text{A.29})$$

como temos um campo constante, a solução é dada por

$$\hat{K}(t) = \exp\left[-\frac{ieaFt}{\hbar}\right]\hat{K} \quad (\text{A.30})$$

em que $\hat{K}(t=0) = \hat{K}^\dagger$. Com isso, podemos escrever que $\hat{K}^\dagger = \exp\left(\frac{ieFat}{\hbar}\right)\hat{K}$. Para a evolução temporal do operador \hat{N} temos

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{N}(t) &= \frac{i}{\hbar} [\hat{K}(t), \hat{N}(t)] \\ &= -\frac{iJ}{\hbar} [\hat{K}(t) + \hat{K}^\dagger, \hat{N}(t)] \\ &= \frac{-iJ}{\hbar} [\hat{K}(t) - \hat{K}^\dagger(t)]\end{aligned}\quad (\text{A.31})$$

de modo que integrando a equação (A.31) para $\hat{N}(t)$ encontramos a solução

$$\hat{N}(t) = \hat{N} + \frac{J}{eFa} \left[\left(e^{i\frac{eFat}{\hbar}} - 1 \right) \hat{K} + \left(e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} - 1 \right) \hat{K}^\dagger \right] \quad (\text{A.32})$$

onde $\hat{N}(t=0) = \hat{N}$.

De posse das soluções (A.30) e (A.31), vamos calcular os valores esperados destes operadores. O valor esperado do operador $\widehat{K}(t)$ é dado por

$$\begin{aligned}\langle \widehat{K}(t) \rangle &= \langle \Psi | \widehat{K}(t) | \Psi \rangle = \left\langle \Psi \left| \exp\left(\frac{-ieFat}{\hbar}\right) \widehat{K} \right| \Psi \right\rangle \\ &= \exp\left(\frac{-ieFat}{\hbar}\right) \langle \Psi | \widehat{K} | \Psi \rangle \\ &= \exp\left(\frac{-ieFat}{\hbar}\right) |\widehat{K}| e^{iak_0}\end{aligned}\quad (\text{A.33})$$

ou ainda, utilizando as definições expostas em (A.27), podemos escrever

$$\langle \widehat{K}(t) \rangle = e^{iak_0} = \sum_n \psi_{n-1}^* \psi_n. \quad (\text{A.34})$$

Para $\widehat{N}(t)$ segue que o valor esperado é

$$\begin{aligned}\langle \widehat{N}(t) \rangle &= \langle \Psi | \widehat{N}(t) | \Psi \rangle \\ &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{J}{eFa} \left[\left(e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} - 1 \right) \langle \widehat{K} \rangle + \left(e^{i\frac{eFat}{\hbar}} - 1 \right) \langle \widehat{K}^\dagger \rangle \right] \\ &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{J}{eFa} |K| \left[\left(e^{-i\frac{eFat}{\hbar}} - 1 \right) e^{iak_0} + \left(e^{i\frac{eFat}{\hbar}} - 1 \right) e^{-iak_0} \right] \\ &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{J}{eFa} |K| \left[e^{-i\left(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0\right)} + e^{i\left(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0\right)} - (e^{iak_0} + e^{-iak_0}) \right]\end{aligned}\quad (\text{A.35})$$

escrevendo este último resultado na sua forma trigonométrica temos que,

$$\begin{aligned}e^{-i\left(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0\right)} + e^{i\left(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0\right)} &= 2 \cos\left(\frac{eFat}{\hbar} - ak_0\right) \\ &= 2 \left[\cos\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \cos(ak_0) + \text{sen}\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \text{sen}(ak_0) \right]\end{aligned}\quad (\text{A.36})$$

$$e^{iak_0} + e^{-iak_0} = 2 \cos(ak_0) \quad (\text{A.37})$$

$$\begin{aligned}\langle \widehat{N}(t) \rangle &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{2J}{eFa} |K| \left[\cos\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \cos(ak_0) + \text{sen}\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \text{sen}(ak_0) - \cos(ak_0) \right] \\ &= \langle \widehat{N} \rangle + \frac{2J}{eFa} |K| \left\{ \left[\cos\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) - 1 \right] \cos(ak_0) + \text{sen}\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \text{sen}(ak_0) \right\}\end{aligned}$$

utilizando as identidades: 1) $\text{sen}^2(x) = [1 - \cos(2x)]/2$, e 2) $\text{sen}(2x) = 2 \cos(x) \text{sen}(x)$ podemos escrever o termo entre colchetes e o *seno* do segundo termo como,

$$\cos\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) - 1 = -2 \text{sen}^2\left(\frac{eFat}{2\hbar}\right) \quad (\text{A.38})$$

e também

$$\text{sen}\left(\frac{eFat}{2\hbar}\right) = 2 \cos\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{eFat}{\hbar}\right) \quad (\text{A.39})$$

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{N}(t) \rangle &= \langle \hat{N} \rangle + \frac{4J}{eFa} |K| \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \left[-\text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \cos(ak_0) + \cos \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \text{sen}(ak_0) \right] \\
 &= \langle \hat{N} \rangle - \frac{4J}{eFa} |K| \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right)
 \end{aligned} \tag{A.40}$$

podemos perceber que o resultado obtido,

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = \langle \hat{N} \rangle - \frac{4J}{eFa} |K| \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right), \tag{A.41}$$

condiz com a equação (A.25) referente a dinâmica da distribuição gaussiana quando, $\langle \hat{N} \rangle = 0$ e $k_0 = 0$.

Para nossa análise, se faz conveniente calcularmos uma expressões para $\langle \hat{K}^2(t) \rangle$ e $\langle \hat{N}^2(t) \rangle$. Para isso, precisaremos apresentar algumas definições. Seja,

$$\begin{aligned}
 L &= |L|e^{i\nu} = \sum_n \psi_{n-2}^* \psi_n = \int_{-b/2}^{b/2} d\kappa |\psi(\kappa)|^2 e^{2i\kappa a} \\
 V &= |V|e^{i\mu} = \sum_n (2n-1) \psi_{n-1}^* \psi_n,
 \end{aligned} \tag{A.42}$$

realizando o mesmo procedimento algébrico utilizado para obtermos as expressões (A.33) e (A.41) encontramos que

$$\langle \hat{K}^2(t) \rangle = L \exp \left(\frac{2ieFat}{\hbar} \right) \tag{A.43}$$

e

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{N}^2(t) \rangle &= \langle \hat{N}^2 \rangle + 2\gamma^2 \text{sen}^2 \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \left(1 - |L| \cos \left(\frac{eFat}{\hbar} - \nu \right) \right) \\
 &\quad + 2\gamma |V| \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \text{sen} \left(\mu - \frac{eFat}{2\hbar} \right),
 \end{aligned} \tag{A.44}$$

para mais detalhes sobre a álgebra realizada na obtenção das expressões (A.43) e (A.44), consultar a referência (HARTMANN et al., 2004).

Utilizando as duas condições iniciais temos que, para a função de onda tipo Delta $\psi_n(t=0) = \delta_{n,0}$, os valores esperados são

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{N} \rangle &= \sum_n \sum_{m,m'} n \psi_m \psi_{m'}^* \langle m'|n \rangle \langle n|m \rangle = \sum_n \sum_{m,m'} n \delta_{m,0} \delta_{m',0} \langle m'|n \rangle \langle n|m \rangle \\
 &= \sum_n n \langle 0|n \rangle \langle n|0 \rangle = \sum_n \delta_{n,0}^2 = \sum_n n \delta_{n,0} = 0
 \end{aligned} \tag{A.45}$$

e

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{K} \rangle &= \sum_n \sum_{m,m'} \psi_m \psi_{m'}^* \langle m'|n \rangle \langle n+1|m \rangle = \sum_n \sum_{m,m'} \delta_{m,0} \delta_{m',0} \langle m'|n \rangle \langle n+1|m \rangle \\
 &= \sum_n \langle 0|n \rangle \langle n+1|0 \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{A.46}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{N}^2 \rangle &= \sum_{n,n'} nn' \sum_{m,m'} \psi_m \psi_m^* \langle m'|n \rangle \langle n|n' \rangle \langle n'|m \rangle \\
 &= \sum_n n^2 \sum_{m,m'} \delta_{m,0} \delta_{m',0} \langle m'|n \rangle \langle n|m \rangle \\
 &= \sum_n n^2 \langle 0|n \rangle \langle n|0 \rangle = \sum_n n^2 \delta_{n,0} = 0
 \end{aligned} \tag{A.47}$$

$$\begin{aligned}
 V &= \sum_n (n-1) \psi_{n-1}^* \psi_n = \sum_n (n-1) \delta_{n-1,0} \delta_{n,0} = 0 \\
 L &= \sum_n \psi_{n-2}^* \psi_n = \sum_n \delta_{n-2,0} \delta_{n,0} = 0
 \end{aligned} \tag{A.48}$$

com esses resultados temos que a equação (A.44) se torna

$$\langle \hat{N}^2(t) \rangle = 2\gamma^2 \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \tag{A.49}$$

de modo que podemos calcular $\Delta \hat{N}(t)$

$$\Delta \hat{N}(t) = \sqrt{\langle \hat{N}^2(t) \rangle - \langle \hat{N}(t) \rangle^2} = \frac{2\sqrt{2}J}{eFa} \left| \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \right| \tag{A.50}$$

Os resultados obtidos nos mostram que, quando consideramos inicialmente a função de onda localizada apenas em um sítio, o pacote de onda evolui no tempo de forma que a posição média $\langle \hat{N} \rangle$ do centro da distribuição permanece constante. Porém, o pacote de onda apresenta uma respiração (*breathing*) com período igual ao de Bloch T_B .

Para a condição inicial em que a função de onda possui uma forma gaussiana, temos que os valores esperados são:

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = \langle \hat{N} \rangle - 2\gamma \text{sen} \left(\frac{eFat}{e\hbar} \right) \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right) \tag{A.51}$$

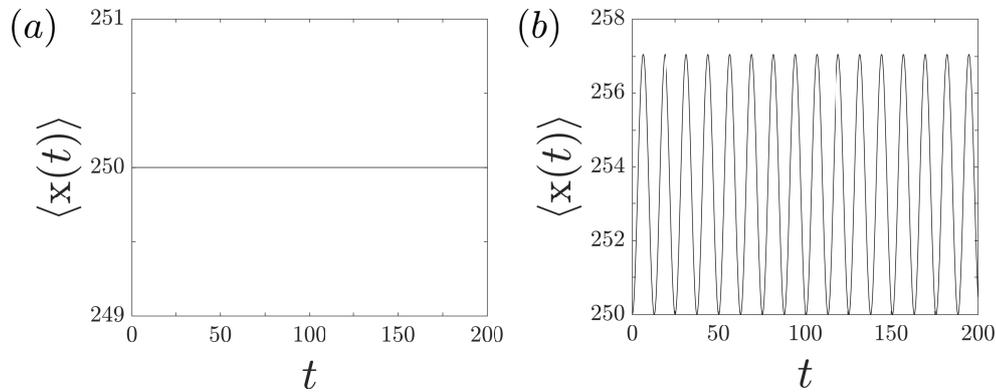
$$\langle \hat{N} \rangle = \sum_n \sum_{m,m'} n \psi_m \psi_m^* \langle m'|n \rangle \langle n|m \rangle = \sum_n n |\psi|^2 = \sum_n n |C|^2 \exp \left(\frac{n^2 a^2}{2\sigma^2} \right) = 0 \tag{A.52}$$

devido ao intervalo $-\infty < n < \infty$ e a gaussiana possui uma distribuição simétrica em relação a posição central n_0 . Desta forma,

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = -2\gamma \text{sen} \left(\frac{eFat}{e\hbar} \right) \text{sen} \left(\frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right) \tag{A.53}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{N}^2(t) \rangle &= \langle \hat{N}^2 \rangle + 2\gamma^2 \text{sen}^2 \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \left(1 - \cos \left(\frac{eFat}{\hbar} - 2ak_0 \right) \right) \\
 &= \langle \hat{N}^2 \rangle + 4\gamma^2 \text{sen}^2 \left(\frac{eFat}{2\hbar} \right) \text{sen}^2 \left(\frac{eFat}{2\hbar} - ak_0 \right) \\
 &= \langle \hat{N}^2 \rangle + \langle \hat{N}(t) \rangle^2
 \end{aligned} \tag{A.54}$$

Figura 35 – Evolução temporal da posição média do pacote de onda para uma rede com $N = 500$ sítios. A intensidade do campo externo nas duas configurações $F = 0.5$. Em (a) a função de onda inicial é uma delta, localizada em $n_0 = 250$. Em (b) a distribuição é uma gaussiana com largura $\sigma = 1$, centrada inicialmente em $n_0 = 250$.



Fonte: Do autor, 2017

de modo que

$$\Delta \hat{N}(t) = \sqrt{\langle \hat{N}^2 \rangle} \quad (\text{A.55})$$

Para uma distribuição dada inicialmente por uma gaussiana, o desvio padrão dessa distribuição não é alterado, de forma que permanece aproximadamente fixo a medida em que o tempo evolui. Porém, a posição média do pacote de onda realiza oscilações coerentes com período igual ao de Bloch T_b , conhecidas também como oscilações de Bloch.

Na figura 35 calculamos numericamente¹ alguns dos resultados analíticos obtidos ao longo desse Apêndice. Mostramos o centroide para as duas configurações utilizadas: Função de onda tipo Delta ($\psi_n(t=0) = \delta_{n,0}$) e para uma função de onda gaussiana (A.21). Em (a) temos a posição média $\langle x(t) \rangle$ para a função de onda delta localizada inicialmente no sítio $n_0 = 100$ de uma rede com $N = 200$ sítios. Este resultado corrobora com a equação, onde nos mostra que, de fato, a posição do centróide para essa configuração inicial é fixa. Em (b) consideramos o pacote inicialmente como uma distribuição gaussiana com largura $\sigma = 1$ e centrado em $n_0 = 100$. Temos que o centroide realiza oscilações coerentes com frequência proporcional a intensidade do campo elétrico aplicado.

¹ Utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Anexos

ANEXO A – Wave packet dynamics under effect of a pulsed electric field



Wave packet dynamics under effect of a pulsed electric field



A.R.C.B. da Silva, F.A.B.F. de Moura, W.S. Dias

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió, AL, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 11 December 2015

Received in revised form

25 February 2016

Accepted 12 March 2016

by Dr. P. Hawrylak

Available online 18 March 2016

Keywords:

Electric field

Electronic dynamics

Localized states

Gaussian-pulse

ABSTRACT

We studied the dynamics of an electron in a crystalline one-dimensional model under effect of a time-dependent Gaussian field. The time evolution of an initially Gaussian wave packet it was obtained through the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation. Our analysis consists of computing the electronic centroid as well as the mean square displacement. We observe that the electrical pulse is able to promote a special kind of displacement along the chain. We demonstrated a direct relation between the group velocity of the wave packet and the applied electrical pulses. We compare those numerical calculations with a semi-classical approach.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The dynamics of a quantum wave-packet on a one-dimensional model under effect of an electric field is a hot topic with several applications in general solid state physics [1–21]. Originally studied by Bloch and Zener about 70 years ago, the most famous phenomenology was obtained by investigating the effect of a constant electric field (DC) under the electronic dynamics in crystalline systems. The main result is the existence of a coherent oscillatory motion with frequency equal to intensity of the static electric field, also called Bloch Oscillations (BO). The experimental observation it was achieved in semiconductor super-lattices only in the nineties [2]. Due to technological advances, BOs have been experimentally studied in other systems, such as Bose–Einstein condensates [3], ultra-cold atoms [4] and optical super-lattices [5]. Within the theoretical point of view, an interesting analysis about the motion of a charged particle on a lattice in the presence of a generic electric field it was done in ref. [8]. The authors demonstrated the presence of a dynamic localization whenever the ratio of the magnitude and the frequency of the electric field is a root of the ordinary Bessel function of order [8]. The effect of scattering caused by imperfections of the lattice it was considered in ref. [9]. In ref. [11] it was shown a detailed analysis of the coherent electronic dynamics under effect of electric static and time-periodic (AC) fields. The authors demonstrated the possibility of to “push” a Gaussian wave-packet by using a oscillating field with frequency tuned at the Bloch frequency [11]. Recently, the properties of Bloch-oscillations in non-Hermitian lattices with a non-vanishing imaginary part of the band dispersion curve it was investigated in ref. [12]. The authors demonstrated by using a generalized acceleration

theorem that a wave packet with narrow spectral distribution undergoes a periodic motion, but following a closed orbit in the complex plane. The competition between electron–electron interaction, electric field effect and dissipation terms it was studied in ref. [13]. By using the Keldysh Greens functions in cluster perturbation theory, the steady-state current it was computed. The authors demonstrated that the current properties are controlled by the Wannier-Stark resonances due to anti-ferromagnetic correlations [13].

The effect of the on-site Hubbard interaction U on the Bloch oscillations of two electrons under effect of an external electric field was investigated in refs. [16–18]. By solving the time-dependent Schrödinger equation for an initially localized two-electron state it was proven that the possibility of the wave packet develops Bloch oscillations where the dominant frequency is the twice of the Bloch frequency predicted by semi-classical approach [17]. It was proposed that this effect is strongly related with the set of two-electron bound states that appear for $U > 0$. That hypothesis was investigated in detailed and proven in ref. [18]. Experimental investigations of Bloch oscillations in optical lattice and ring cavity were done in refs. [20,21]. By using interacting atoms in optical lattices, it was observed strongly correlated Bloch oscillations as well as correlations in two-particle quantum movement [21]. In special, the experiment conducted in ref. [21] proved the existence of Bloch oscillations with double frequency, previously obtained in ref. [17] through theoretical experiments.

In ref. [22] it was proposed that a superposition of a static field and a harmonic one can promote electronic dynamics in low-dimensional systems. It was also shown that the electronic velocity depends on the magnitudes of the AC and DC field

components and the initial phase of the AC field. Transport over macroscopic distances has been recently reported in Bose-Einstein condensates with weak interaction in a tilted lattice under simultaneous influence of a DC and AC fields [23]. In this work we provide further studies about the specificity of the electronic dynamics under effect of time-dependent electric fields. We consider an electron moving in a regular one-dimensional(1D) lattice under effect of an external electric field $F(t)$. The external field consists of a Gaussian-pulse. We emphasize that pulsed external fields (including Gaussian-Pulses) have been used in several contexts of science [24–31]. For example, the effect of ultra short electric pulses on biological cells, tissues, and organs has attracted a great interest [29,30]. In our work, we will follow the time evolution of an initially Gaussian electronic wave packet under effect of an external Gaussian-electric pulse. We will compute typical tools that characterized the wave-packet dynamics along the chain, namely the electron's position and the mean-square displacement. Our calculations demonstrated an unusual electron dynamics quite related with the kind of pulse electric field we have considered. Our analysis suggests that the electrical pulse is able to promote a interesting electronic dynamics along the chain. Results revealed that the velocity of the particle can be controlled through the type electric pulses applied and it is possible to easily speed up or slow down the electron.

2. Time-dependent Schrödinger equation and formalism

Our model consists of an electron moving in a regular one-dimensional chain with N sites driven by an external field $F(t)$. The internal distance between the nearest neighbors is a . The tight-binding Hamiltonian that describe our model can be written as

$$H = J \sum_{n=1}^N (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) \sum_{n=1}^N (\epsilon_n - eF(t)na) |n\rangle\langle n|, \quad (1)$$

where $|n\rangle$ is a Wannier state localized at site i with energy ϵ_n , J is the inter-site coupling restricted to nearest-neighbors, e is the particle charge. The temporal evolution of the wave-function components in the Wannier representation ($|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle$) is governed by the time-dependent Schrödinger equation

$$i\dot{\psi}_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} - eF(t)n\psi_n. \quad (2)$$

Here, we will use units such that $\hbar = e = a = J = 1$. The on-site energies ϵ_n were taken as the reference energy ($\epsilon_n = 0$) and time is expressed in units of \hbar/J . The external field consists of a Gaussian-pulse [31], which can be expressed as

$$F(t) = B(\rho) \exp\left[-\frac{(t-\tau)^2}{4\rho^2}\right], \quad (3)$$

where ρ controls the duration of each pulse and τ is the time of reference. We can observe that for a finite and small ρ and a single value of τ , $F(t)$ represent a single pulse around $t \approx \tau$. We are interested in consider a collections of pulses, i.e., we will consider some distinct values of τ . The above set of equations were solved numerically by using fourth order Runge-Kutta method with step-size about 10^{-4} in order to to keep the wave-function norm conservation ($1 - \sum_n |\psi_n(t)|^2 \leq 10^{-13}$) along the entire time interval considered. The initial wave-packet will be consider a Gaussian wave packet with width σ defined as

$$\psi_n(t=0) = \frac{1}{A(\sigma)} \exp\left[-\frac{(n-n_0)^2}{4\sigma^2}\right], \quad (4)$$

where the initial position of the particle (n_0) is the center of chain (i.e. $n_0 = N/2$). After solving the set of equations we will compute the centroid $\bar{x}(t)$ and the mean-square displacement $\xi(t)$ i.e.,

typical quantities that can bring information about the eigenstates and wave-packet time-evolution. These tools are defined as:

$$\bar{x}(t) = \sum_n n |\psi_n(t)|^2, \quad (5)$$

and

$$\xi(t) = \sqrt{\sum_n [n - \bar{x}(t)]^2 |\psi_n(t)|^2} \quad (6)$$

The centroid $\bar{x}(t)$ represent the electronic position and $\xi(t)$ is a measurement of the spread of the wave-function. We will also analyzing the wave-function profile $|\psi_n(t)|^2$ versus t and n in order to understand better the effect of Gaussian-pulse electric field under the electronic dynamics.

3. Results

We will show initially our results for the temporal wave packet profile $|\psi_n(t)|^2$ versus t and n (see Fig. 1). Calculations were done for $N=400$. The initial wave packet it was a Gaussian with $\sigma = 1.0$. In our first numerical experiment we have considered four electric pulses with $\rho = 1$, and $\tau = 10, 25, 45, 55$ time units. We adjusted the value of $B(\rho = 1)$ in order to impose that the impulse I of each pulse is given by: $I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(t) dt = \pi/2$. In fig. 1 we observe the behavior of the electronic function in time and space. We note that in the early stages of temporal evolution ($t < 10$) the wave packet widens on the lattice. For short times, the electric field is absent and therefore the wave-function moves without any interaction. However, after the first pulse be applied, the wave packet seems to be “pushed” for one of the chain edges. We observe that this driven motion is stopped after the application of the second pulse ($t=25$). After the second pulse, the wave packet seems to develops movement with small (almost null) group velocity. We also observe a kind of ondulatory behavior. After the third pulse at $t=45$ a counter-intuitive behavior is observed. The particle restarts its movement however, in the opposite orientation. For $t=55$ time units, the wave packet is subjected to a new electric field pulse and an interruption of the particle movement can be observed again. This behavior can be understood following semi-classical

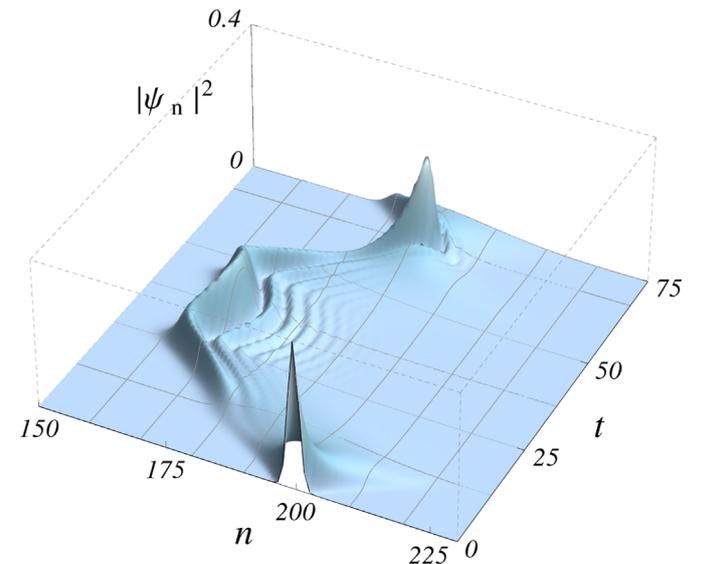


Fig. 1. (Color online) Time evolution of the wave packet with $N=400$ sites. The initial condition was a gaussian wave packet width $\sigma = 1.0$. We have used four pulses each one with impulses $I = \pi/2$. The pulses were applied at times $\tau = 10, 25, 45, 55$ time units.

arguments. For a particle of charge e , we can use the acceleration theorem and written the wave vector k as :

$$k = k_0 + \frac{e}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{F}(t) dt. \quad (7)$$

The group velocity of wave-packet centered around some k' state is given by the gradient of the dispersion relation

$$v(k') = \left. \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right|_{k'}. \quad (8)$$

Therefore, by using the energy dispersion obtained in our case ($E(\mathbf{k}) = 2J \cos(ka)$), we can written $v(k)$ as

$$v(k) = -\frac{2Ja}{\hbar} \sin\left(k_0 a + \frac{ea}{\hbar} I\right), \quad (9)$$

where $I = \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{F}(t) dt$ is the impulse. Therefore by using this semi-classical formalism we can understand the effect of pulsed electric field on the electronic transport. We can observe that after the first pulse be applied, the wave packet changes its initial wave vector from ($k_0 = 0$) to $k = \pi/2$ thus implying in a change of its group velocity. Following the same arguments, we can conclude that, after the second pulse be applied, the wave-vector change to $k = \pi$, in good agreements with the absence of group velocity found in Fig. 1. The change of orientation found after the third pulse be applied is related with a wave-vector values $k = 3\pi/2$. After the fourth pulse, the wave-vector changes to $k = 2\pi$ and the group velocity vanishes again in good agreements with Fig. 1. A more quantitative study is shown at Fig. 2. We show in Fig. 2(a) the plot of the electric field versus time. We can see clearly that the four pulses were considered for $t = 10, 25, 45, 55$ (the same case as in Fig. 1). In Fig. 2(b) and (c) we plot respectively the centroid and the

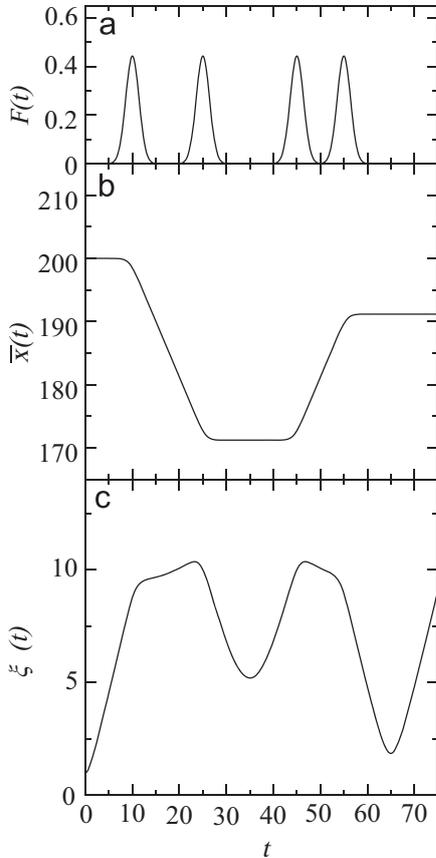


Fig. 2. Calculations of centroid and the mean square displacement for the same case of the Fig. 1. In (a) we plot the electric field versus time. We can see clearly the four pulses considered for $t = 10, 25, 45, 55$.

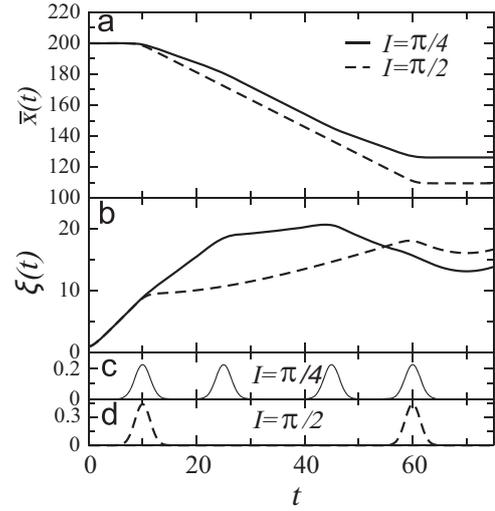


Fig. 3. (a,b) Numerical calculations of the centroid and mean square displacement. The experiments were done by considering two distinct types of time dependent electric field: The first one is a sequence of four pulses each one with impulse $I = \pi/4$ (see results showed in solid line and the electric field profile in (c)); the second case is a sequence of two pulses each one with $I = \pi/2$ (see results in dashed line and the electric field profile (d)). Calculations were done for an initial Gaussian wave packet with $\sigma = 1.0$ and $N = 400$.

mean-square displacement versus time (t). In good agreements with the description showed in Fig. 1, the centroid displays an interesting dynamics, strongly dependent on the electric pulses. The mean-square displacement dynamics reveals an increasing for short times (i.e., in the absence of electric field). After the pulses are applied, this tendency is weakened or even reversed. Due to the change in the movement direction, the electronic wave-packet suffers interference and can decrease the width ξ as can be seen in Fig. 2c. In order to elucidate better the correspondence between the quantum mechanical description and the semi-classical approach, we shown in Fig. 3(a,b) the electronic centroid $\bar{x}(t)$ and $\xi(t)$ for two distinct experiments. We consider two distinct types of time dependent electric field: the first one is a sequence of four pulses each one with impulse $I = \pi/4$. Our calculations are shown in Fig. 3(a,b) (solid line) and the electric field temporal profile can be found in Fig. 3(c). The second experiment we have performed consisted of a sequence of two pulses each one with $I = \pi/2$ (see results in Fig. 3(a,b) dashed line). The electric field profile can be found in Fig. 3(d). Calculations were done for an initial wave packet with $\sigma = 1.0$ and $N = 400$. We emphasize that the total impulse transferred for the wave-packet in both experiments was 2π therefore, from the qualitative point of view, the results should be similar. By analyzing the Fig. 3(a,b) we observed a qualitative agreements between the dashed and solid curve. However, from the quantitative point of view, we observe that the case with $I = \pi/2$ promotes a biggest change at the wave-packet's velocity, in good agreements with the semi-classical approach. Moreover, we also observed that the mean square displacement ξ exhibits a roughly controlled behavior. In contrast with the case without electric field in which that the electron wave-packet spreads ballistically, the wave-packet here seems to keep trapped in a finite fraction of the lattice. It is an interesting key point because suggests that the pulsed electric field can be used to “push” the wave-packet and keeping its width finite. We can use this superposition of pulsed electric fields as tweezers to electronic manipulation.

In Fig. 4 we investigated the time evolution of an initial gaussian wave-packet with $\sigma = 1$ and 4 under effect of a single electric field pulse with several values of impulse I . In Fig. 4(a,c) we plot the centroid versus time for $I = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/4, \pi/4, \pi$. Calculations

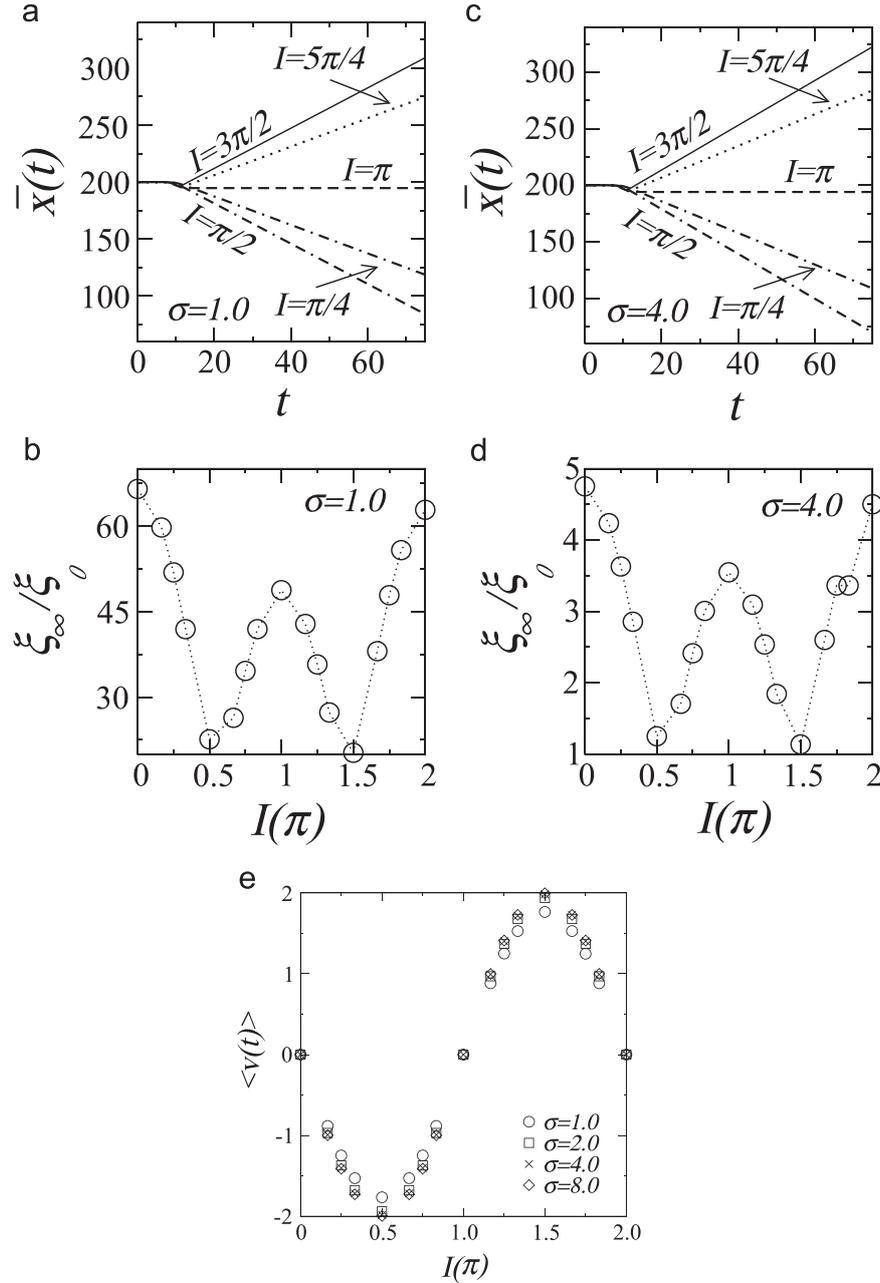


Fig. 4. (a,c) The centroid versus time for an initial gaussian with $\sigma = 1$ (a) and $\sigma = 4$ (c) under effect of a single pulse with $I = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/4, \pi/4, \pi$. (b,d) the ratio between the mean square displacement for long time and the initial mean square displacement (ξ_∞/ξ_0); calculations were done for $\sigma = 1$ (b) and $\sigma = 4$ (d). (e) The group velocity versus I for $\sigma = 1$ up to 8.

were done for $\sigma = 1$ (a) and $\sigma = 4$ (c). We observe that a single pulse with impulse I is able to promote the movement of the particle in several directions of the chain. The direction and the electronic velocity is strongly related with the intensity of impulse, in good agreements with our semi-classical formalism (see Eq. (9)). However, it is interesting to investigate also the wave-packet spread and its relation with the applied pulsed electric field. In Fig. 4(b,d) we plot the ratio ξ_∞/ξ_0 versus the impulse I . Here, ξ_∞ represent the mean square displacement for long time and ξ_0 the mean square displacement in the early stage of the time evolution ($t \approx 0$). We emphasize that the border effect here are numerically negligible. Our results reveals a richness of properties and an interesting dependence of the wave-packet spread with the impulse I . For both values of σ we observe that for the most values of I , the wave-packet spreads within the chain. For $I \approx \pi/2$ and $3\pi/2$ we can

observe a decreasing of the ratio ξ_∞/ξ_0 . For $\sigma = 4$ we can see that the wave-packet spreads less than the case with $\sigma = 1$ and for $I \approx \pi/2$ and $3\pi/2$ does not spread ($\xi_\infty \approx \xi_0$). We can give some heuristic arguments to understand those previous finds. For large σ (e.g. $\sigma = 4$), the initial wave-packet is narrow in frequencies. Therefore, for $\sigma \gg 1$, the initial wave-packet is a superposition of modes with small group velocity and therefore, the mobility is smaller thus promoting the decreasing of ratio ξ_∞/ξ_0 . For $I \approx \pi/2$ and $3\pi/2$ we emphasize that the group velocity for these cases is maximum (see Eq. (9)) therefore, the intrinsic interference of the wave-packet during the push promotes the drastic decreasing of the mean square displacement. Fig. 4(e) shows the group velocity for each value of impulse I . The sine behavior of the group velocity is in good agreements with the semi-classical prediction described in the Eq. (9). We highlight these two factors as essential for using this

technique for manipulating particles in lattices. So the velocity of the particle and its position within the lattice become predictable and controllable through adjustments to electric pulses applied.

4. Summary and conclusions

In this work we have considered a one-electron wave-packet confined in a regular one-dimensional chain under effect of an external time- dependent electric field $F(t)$. The external electric field $F(t)$ consisted of a collection of short Gaussian-pulses. We have followed the time evolution of an initially Gaussian wave packet and compute the electronic positions and the wave-packet spread. The Schrödinger equation it was solved by using a standard fourth order Runge–Kutta formalism. The numerical validation it was obtained by checking the wave-function normalization during the integration. Our calculations suggest that the electrical pulse can promote a new type of electronic dynamics along the chain. Our calculations also indicate that the velocity of the particle can be controlled by the specificities of the applied electric pulses. In our numerical experiments we have demonstrated the possibility of driving the electron along the chain, reverse the direction and also to brake the particle during a short interval. We also provide a detailed description of the time-dependent behavior of the width of the wave-function. Our calculations indicate the possibility of to keep the wave-function trapped in a finite fraction of lattice even at the cases in which that the centroid exhibits mobility. We emphasize that our calculations are interesting within the context of manipulate charged particles in low-dimensional systems. We have used a simple semi-classical formalism that explains in detail the phenomenology studied here. Our results provide a good agreement between the numerical calculations and semi-classical investigation. We hope that our work encourages further investigation about the manipulation of particles in low-dimensional systems using pulsed electric fields.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), CNPq-Rede Nanobioestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas research agency, Grant number 2011.0908.011.0025.0087).

References

- [1] F. Bloch, *Z. Phys.* 52 (1929) 555; C. Zener, *Proc. R. Soc. A* 145 (1934) 523.
- [2] C. Waschke, H.G. Roskos, R. Schwedler, K. Leo, H. Kurz, K. Kohler, *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 3319.
- [3] B.P. Anderson, M.A. Kasevich, *Science* 282 (1998) 1686.
- [4] M. Ben Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 4508; S.R. Wilkinson, C.F. Bharucha, K.W. Madison, Q. Niu, M.G. Raizen, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 4512.
- [5] R. Sapienza, P. Costantino, D. Wiersma, M. Ghulinyan, C.J. Oton, L. Pavesi, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 263902.
- [6] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders, 1976.
- [7] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York, 1963.
- [8] D.H. Dunlap, V.M. Kenkre, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 3625.
- [9] D.H. Dunlap, V.M. Kenkre, *Phys. Rev. B* 37 (1988) 6622.
- [10] D.H. Dunlap, V.M. Kenkre, *Phys. Lett. A* 127 (1988) 438.
- [11] T. Hartmann, F. Keck, H.J. Korsch, S. Mossmann, *New J. Phys.* 6 (2004) 2.
- [12] S. Longhi, *Phys. Rev. A* 92 (2015) 042116.
- [13] Jakob Neumayer, Enrico Arrigoni, Markus Aichhorn, Markus Aichhorn, Wolfgang von der Linden, *Phys. Rev. B* 92 (2015) 125149.
- [14] J. Stockhofe, P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* 91 (2015) 023606.
- [15] S. Longhi, Giuseppe Della Valle, *Phys. Rev. B* 86 (2012) 075143.
- [16] J.F. Weisz, F. Claro, *J. Phys.: Condens. Matter* 15 (2003) 3213.
- [17] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 155124.
- [18] W.S. Dias, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Lett. A* 374 (2010) 4554.
- [19] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 045116.
- [20] M. Samoylova, N. Samoylova, G.R.M. Robb, R. Bachelard, Ph.W. Courteille, *Opt. Express* 23 (2015) 14823.
- [21] P.M. Preiss, R. Ma1, M.E. Tai1, A. Lukin1, M. Rispoli1, P. Zupancic, Y. Lahini, R. Islam, M. Greiner, *Science* 347 (6227) (2015) 1229–1233.
- [22] R.A. Caetano, M.L. Lyra, *Phys. Lett. A* 375 (2011) 2770.
- [23] Elmar Haller, Russell Hart, Manfred J. Mark, Johann G. Danzl, Lukas Reichsöllner, Hanns-Christoph Nägerl, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 200403.
- [24] Taeko I. Urano, Hiro-o Hamaguchi, *Chem. Phys. Lett.* 195 (1992) 287.
- [25] F.L. Moore, J.C. Robinson, C.F. Bharucha, Bala Sundaram, M.G. Raizen, *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 4598.
- [26] Q. Hu, S. Viswanadham, R.P. Joshi, K.H. Schoenbach, S.J. Beebe, P.F. Blackmore, *Phys. Rev. E* 71 (2005) 031914.
- [27] Karl H. Schoenbach, Stephen J. Beebe, E. Stephen Buescher, *Bioelectromagnetics* 22 (2001) 440–448.
- [28] Marie Breton, Lucie Delemotte, Aude Silve, Lluís M. Mir, Mounir Tarek, *J. Am. Chem. Soc.* 134 (2012) 13938–13941.
- [29] Stephen J. Beebe, Karl H. Schoenbach, *J. Biomed. Biotechnol.* 4 (2005) (2005) 297–300.
- [30] Stephen J. Beebe, Member, IEEE, P.M. Fox, L.J. Rec, K. Somers, Robert H. Stark, Karl H. Schoenbach, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 30 (2002) 286.
- [31] Guangjiong Dong, Weiping Lu, P.F. Barker, *Phys. Rev. A* 69 (2004) 013409.

ANEXO B – Unidirectional quantum
walk of two correlated particles:
Manipulating bound-pair and unbound
wave-packet components



Unidirectional quantum walk of two correlated particles: Manipulating bound-pair and unbound wave-packet components



A.R.C. Buarque, W.S. Dias*

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió, AL, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 11 May 2017

Received in revised form 3 August 2017

Accepted 3 August 2017

Available online 9 August 2017

Communicated by P.R. Holland

Keywords:

Interacting quantum walk

Unidirectional transport

Correlated particles

ABSTRACT

We study the unidirectional transport of two-particle quantum wave-packets in a regular one-dimensional lattice. We show that the bound-pair state component behaves differently from unbound states when subjected to an external pulsed electric field. Thus, strongly entangled particles exhibit a quite distinct dynamics when compared to a single particle system. With respect to centroid motion, our numerical results are corroborated with an analytical expression obtained using a semi-classical approach. The wave function profile reveals that the particle–particle interaction induces the splitting of the initial wave-packet into two branches that propagate with specific directions and drift velocities. With a proper external field tuning, the wave-packet components can perform an unidirectional transport on the same or opposite directions. The amplitude of each mode is related to the degree of entanglement between particles, which presents a non monotonic dependence on the interaction strength.

© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Unlike a classic random walker, a quantum walk can be in a coherent superposition of several positions and exploring multiple trajectories over an n -dimensional graph. In periodic systems, for example, the quantum particle propagates much faster (ballistic propagation) than its classical counterpart (diffusive propagation) [1]. Quantum walkers have been widely studied in a variety of different settings such as in the development of quantum algorithms [2–4], ferromagnetic films [5], efficient energy transfer in proteins complex [6], classical optics [7,8], waveguide lattices [9, 10], nuclear magnetic resonance [11], quantum dots [12], trapped atoms in optical lattices [13,14], disorder [15,16], interacting particles [17–20] and bacteria behavior in biological systems [21]. Categorized in two classes, the evolution of the walker is determined completely by a unitary time evolution in both. In discrete-time quantum walks, the particle propagates in discrete steps determined by a dynamic internal degree of freedom, which plays the role of a quantum coin [22]. In the continuous-time quantum walks the dynamics is described by a time-independent lattice Hamiltonian, without coin-like degrees of freedom [23].

Despite the recent progress, many investigations on quantum walks are related to a single walker, primarily in the experimental scope. On the other hand, quantum effects are considerably

enhanced in systems with more than one walker. In such cases, generalizations that consider many interacting walkers can provide useful information regarding to universal and efficient quantum computation [24]. Interaction between walkers typically results in the appearance of entanglement and have been shown to improve certain aspects, such as in the graph isomorphism problem [25]. Quantum walks of interacting and non-interacting quantum particles are fundamentally different in the context of solving the computational problem of graph isomorphism. In this case, it was reported that two interacting bosons are more powerful than single particles and two non-interacting particles for distinguishing non-isomorphic strongly regular graphs [26]. The on-site interaction of two particles is able to enhance the superdiffusive propagation in one-dimensional deterministic aperiodic systems [20]. Quantum walks of two identical photons revealed quantum correlations that depended critically on the input state of the quantum walk [10]. Fundamental effects such as the emergence of correlations in two-particle continuous-time quantum walks were recently reported for interacting atoms in an optical lattice [14]. The control over the interacting atoms in the regime where the dynamics is dominated by interparticle interactions made it possible to observe the frequency doubling of Bloch oscillations [27,28], predicted for electron systems and recently simulated with photons in a waveguide array [29]. Bloch oscillations have also been reported in a discrete-time quantum walks of two interacting particles, where a continuous transition from boson bunching to fermion anti-bunching was shown [18].

* Corresponding author.

E-mail address: wandearley@fis.ufal.br (W.S. Dias).

Within the studies involving quantum dynamics under the influence of external fields, the unidirectional quantum walk promoted by superposed static and harmonic fields has been greatly explored in continuous-time quantum walks [30–35]. A weakly interacting Bose–Einstein condensate of Cs atoms in a tilted lattice potential was used to demonstrate that harmonic driving can lead to matter-wave transport over macroscopic distances [32]. This directed motion is promoted when the frequency of the AC field is a multiple of the frequency of the usual Bloch oscillations. Furthermore, the average velocity displayed by the wave-packet depends on the magnitudes of the AC and DC field components and on the initial phase of the AC field. Super-Bloch oscillations and breathing take place with an amplitude that diverges as the resonance condition is approached [33]. For initially localized and uncorrelated two-particle quantum wave-packets evolving in a 1D discrete lattice, it has been reported that the particles become strongly entangled when directed by a harmonic AC field which is resonant with frequency-doubled Bloch oscillations promoted by a static DC field [34]. These theoretical and experimental works have shown the possibility of using external fields to manipulate entangled matter-states.

The aim of this paper is to propose a new protocol for manipulating quantum matter-states of two correlated particles in a regular one-dimensional (1D) lattice. More specifically, in the framework of the tight-binding Hubbard model Hamiltonian with on-site inter-particle interaction, we consider continuous two-particle quantum walks under the effect of a Gaussian time-dependent electric field (see section 2). Pulsed external fields (including Gaussian-Pulses) have been used in different scientific contexts [36–41], making the experimental implementation feasible. In section 3, we will follow the time evolution of wave-packets and compute typical physical quantities to characterize the wave-packet dynamics along the chain. In particular, we will show that a proper tuning of the pulsed electric field can control the migration of a pair of strongly entangled particles. Our numerical results are corroborated with an analytical expression obtained using a semi-classical approach. Since the external field acts in a different way on bound-pair and unbound states, we will show that the initial wave-packet splits into two branches which propagates in specific directions and drift velocities. The amplitude of each mode will be related to the degree of entanglement of the two particles, which exhibits a non-monotonic dependence on the interaction between particles. As such, we explore the possibility of controlling the direction and drift velocity of two distinct wave-packet components. In section 4 we present our conclusions and point out that recent experimental achievements give strong evidences that the scheme proposed here is feasible.

2. Model and formalism

The system under consideration contains two interacting particles placed in a one-dimensional discrete lattice of spacing a under the action of an external electric field. In the framework of the tight-binding Hubbard model, the Hamiltonian can be described as

$$H = \sum_n \sum_{s=1,2} J(c_{n+1,s}^\dagger c_{n,s} + c_{n,s}^\dagger c_{n+1,s}) + \sum_n \sum_{s=1,2} [\epsilon_n - eF(t)\mathbf{an}] c_{n,s}^\dagger c_{n,s} + \sum_n U c_{n,1}^\dagger c_{n,1} c_{n,2}^\dagger c_{n,2}, \quad (1)$$

where $c_{n,s}$ and $c_{n,s}^\dagger$ are the annihilation and creation operators for particles of charge $-e$ at site n with spin s , J is the nearest-neighbor hopping amplitude and ϵ_n is the potential at site n . In the

second term, $F(t)$ is the external electric field and \mathbf{n} is the position operator, so that the external force felt by a particle of charge $-e$ is given by $-eF(t)$. In the last term U is the on-site Hubbard interaction. A possible physical realization of the present model consists of two bosonic atoms in an optical lattice under a tilting pulse. It has been recently shown experimentally that two interacting bosons in a tilted optical lattice [14] has similar features of two interacting charged particles under an external uniform field [27]. Here, the external field consists of a Gaussian-pulse applied parallel to the chain length, which can be expressed as

$$F(t) = B(\rho) \exp\left[-\frac{(t-\tau)^2}{4\rho^2}\right], \quad (2)$$

where ρ controls the duration of each pulse and τ is the time of reference. For very small values of ρ , $F(t)$ represents a delta-like pulse at $t \approx \tau$. Pulsed external fields (including Gaussian-Pulses) have been reported in different settings such as reorientation of nematic liquid crystals [36], the experimental realization of a quantum δ -kicked rotor in ultracold sodium atoms trapped in a 1D potential [37], analysis of the transient membrane response for cells [38], deceleration and bunching of cold molecules [39] and wave-packet manipulation using pulses with a smooth envelope [41].

In the following, we will consider the case $U > 0$, corresponding to Hubbard repulsion. In order to follow the time evolution of wave-packets, we solved the time-dependent Schrödinger equation by expanding the wave function in the Wannier representation $|\Phi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} f_{n_1, n_2}(t) |n_1, 1; n_2, 2\rangle$ where the ket $|n_1, 1; n_2, 2\rangle$ represents a state with one particle with spin 1 at site n_1 and the other particle with spin 2 at site n_2 . We consider the particles distinguishable by their spin state. Once the initial state is prepared as a direct product of states, the particles will always be distinguishable by their spins since the Hamiltonian does not involve spin exchange interactions. The temporal evolution of the wave function components in the Wannier representation is governed by the time-dependent Schrödinger equation

$$i \frac{df_{n_1, n_2}(t)}{dt} = f_{n_1+1, n_2}(t) + f_{n_1-1, n_2}(t) + f_{n_1, n_2+1}(t) + f_{n_1, n_2-1}(t) + [\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} - F(t)(n_1 + n_2) + \delta_{n_1, n_2} U] f_{n_1, n_2}(t), \quad (3)$$

where the on-site energies ϵ_n were taken as the reference energy ($\epsilon_n = 0$) and we used units of $\hbar = J = e = a = 1$. The above set of equations were solved numerically by using eight-order Runge-Kutta method with step size about 10^{-3} in order to keep the wave function norm conservation along the entire time interval considered. We followed the time evolution of an initially Gaussian wave-packet with width σ :

$$\langle n_1, 1; n_2, 2 | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\sigma)} e^{-\frac{(n_1 - n_1^0)^2}{4\sigma^2}} e^{-\frac{(n_2 - n_2^0)^2}{4\sigma^2}}, \quad (4)$$

where the initial positions (n_1^0, n_2^0) were considered to be centered at $(N/2 - d_0, N/2 + d_0)$. Through the above-described approach, we computed typical quantities that can bring information about the wave-packet time-evolution, as it will be detailed below.

3. Results and discussion

We start following the time evolution of the wave-packet centroid associated with each particle defined as

$$\bar{n}_i(t) = \sum_{n_1, n_2} (n_i) |f_{n_1, n_2}(t)|^2, \quad i = 1, 2. \quad (5)$$

Due to the symmetry of the initial state and interaction Hamiltonian, one has that $\bar{n}_1(t) = \bar{n}_2(t)$. In Fig. 1 we plot the centroid

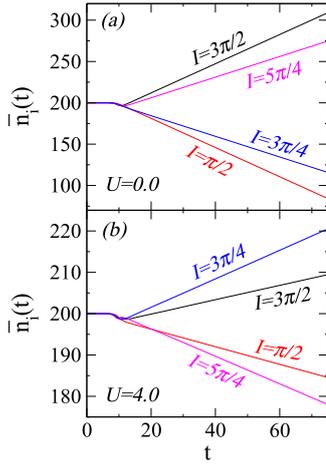


Fig. 1. Time evolution of the average position of particle 1 for four settings of electric field pulses applied at $\tau = 10$ time units. The resulting impulses of the electric pulses are $I = 3\pi/2, 5\pi/4, 3\pi/4, \pi/2$. The dynamic behavior displayed by particles with interaction strength $U = 4.0$ is clearly distinct from that provided by non-interacting particles ($U = 0$).

evolution for an initial wave-packet width $\sigma = 1.0$, $d_0 = 0$ and (a) $U = 0.0$ and (b) $U = 4.0$. We adjusted the value of $B(\rho = 1)$ in order to apply an electric pulse at time $\tau = 10$ whose impulse $[I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(t)dt]$ was $I = 3\pi/2; 5\pi/4; 3\pi/4$ or $\pi/2$. The electric pulse changes the momentum, i.e. the initial wave-vector of wave-packet, thus implying in a change of its group velocity. However, the dynamic behavior displayed by particles with interaction strength $U = 4.0$ is clearly distinct from that provided by non-interacting particles ($U = 0$). While $U = 0.0$ shows trends consistent with the single-particle formalism (see Ref. [42]), for $U = 4.0$ some electric pulse settings imposes a movement in the opposite direction to that observed for $U = 0.0$. Results suggest that the interaction plays an important role on the particles dynamics, with a quite distinct energy dispersion when compared with the case of non-interacting particles.

In order to better characterize the wave-packet dynamics, we collected the centroid after different electric pulse settings. With these data, we computed the average centroid velocity $\langle v(t) \rangle$ for each value of the field impulse. We plot in Fig. 2 $\langle v(t) \rangle$ versus I (in π units) for initial wave-packets width $\sigma = 1.0; 4.0$ and (a) $U = 0.0$, (b) $U = 4.0$ and (c) $U = 10.0$. As the previous results showed, the behavior for $U = 0.0$ (see Fig. 2a) recovers the single particle dynamics [42]. A clear understanding of the underlying physical process can be reached by using a semi-classical formalism. For a particle of charge e , the wave-vector k after an electric pulse is

$$k = k_0 + \frac{e}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} F(t)dt. \quad (6)$$

Thus, keeping in mind the energy dispersion of the single particle problem and its relationship with the group velocity of wave-packet centered around some k' state, the sine-like behavior displayed in Fig. 2a is easily recovered. By increasing of the initial wave-packet width, the dynamics converges to semiclassical prediction, with limits $\pm 2Ja/\hbar$. For a narrow initial wave-packet ($\sigma = 1.0$) and intermediate interaction strength $U = 4.0$ (see Fig. 2b), $\langle v(t) \rangle$ displays a distinct dependence on the field impulse. Now, besides the pure (unbound) states covering the range $-4J \leq E \leq 4J$, there is a band of bound-pair states covering the range $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ [27,43]. These bound-pair states plays a predominant role in the wave-packet dynamics [14, 19,20,27,43–45]. By assuming a transformation to the center-of-mass coordinate $f(n_1, n_2) = e^{ik(n_1+n_2)a} \chi(n_1 - n_2)$ it is possible to

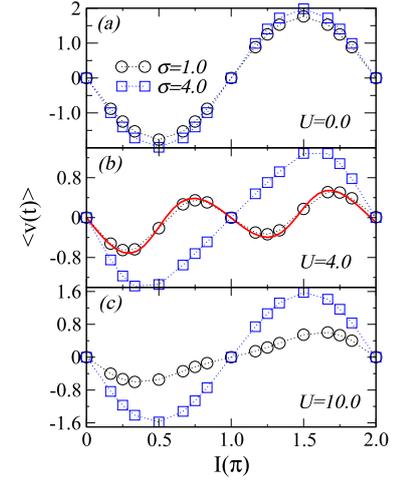


Fig. 2. Impulse dependence of the centroid velocity for (a) $U = 0.0$, (b) $U = 4.0$ and (c) $U = 10.0$ and two distinct initial wave-packets $\sigma = 1.0, 4.0$. For $U = 0.0$ the sine-like behavior is in good agreement with the semi-classical prediction for non-interacting particles. On the other hand, for an intermediate interaction strength, the bound states seem to play a predominant role on the dynamics of particles. The solid line corresponds to the semi-classical dependence for particles performing coherent hoppings.

show (more technical details are found in Ref. [43]) that in the absence of interaction U we have

$$E = 4J \cos(ka) \cos(za). \quad (7)$$

Here, k is the center of mass momentum and z is the relative momentum between particles. Besides, we have in the presence of Hubbard interaction

$$E = \sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}, \quad (8)$$

related to the bound-pair states. With these last two expressions, since the group velocity of a wave-packet is $v(k) = \frac{1}{\hbar} \partial E(k) / \partial k$, we obtain

$$v(k) = \gamma \frac{\sin(ka) \cos(ka)}{\sqrt{U^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}} - \beta \sin(ka) \cos(za), \quad (9)$$

where γ and β are constants. We fitted the data in Fig. 2b with the above expression (represented by the solid line) and achieved an excellent agreement of the numerical data with our semi-classical prediction for strongly correlated particles. With increasing of the initial wave-packet width, the unbound states components predominates, which considerably reduces the correlation between particles. While the interaction favors the coherent hopping associated with bound-pair states, the double occupancy probability decreases for wide wave-packets. This characteristics becomes clear when we observe that the impulse dependence of the average velocity gets closer of the non-interacting particles case for strong Hubbard interaction (see Fig. 2c).

In order to exemplify the competitive character presented above it is shown in Fig. 3 the time evolution of the one-particle wave function profile in the absence of interaction ($U = 0.0$), intermediate ($U = 4.0$) and strong particle-particle interaction ($U = 10.0$). Here, $d_0 = 0$ and the electric pulse was applied at $\tau = 10$ time units, whose resulting impulse are: top panels $I = 5\pi/4$ and bottom panels $I = \pi/3$. For both electric field configurations, $U = 0.0$ shows that the entire wave-packet is driven to perform a unidirectional transport along the chain, consistent with the single-particle formalism. On the other hand, the electric pulse on the system with the interaction between particles turned on induces the splitting of the wave-packet into two wavefronts. One is associated to unbound states, while the other is governed by bound-pair states.

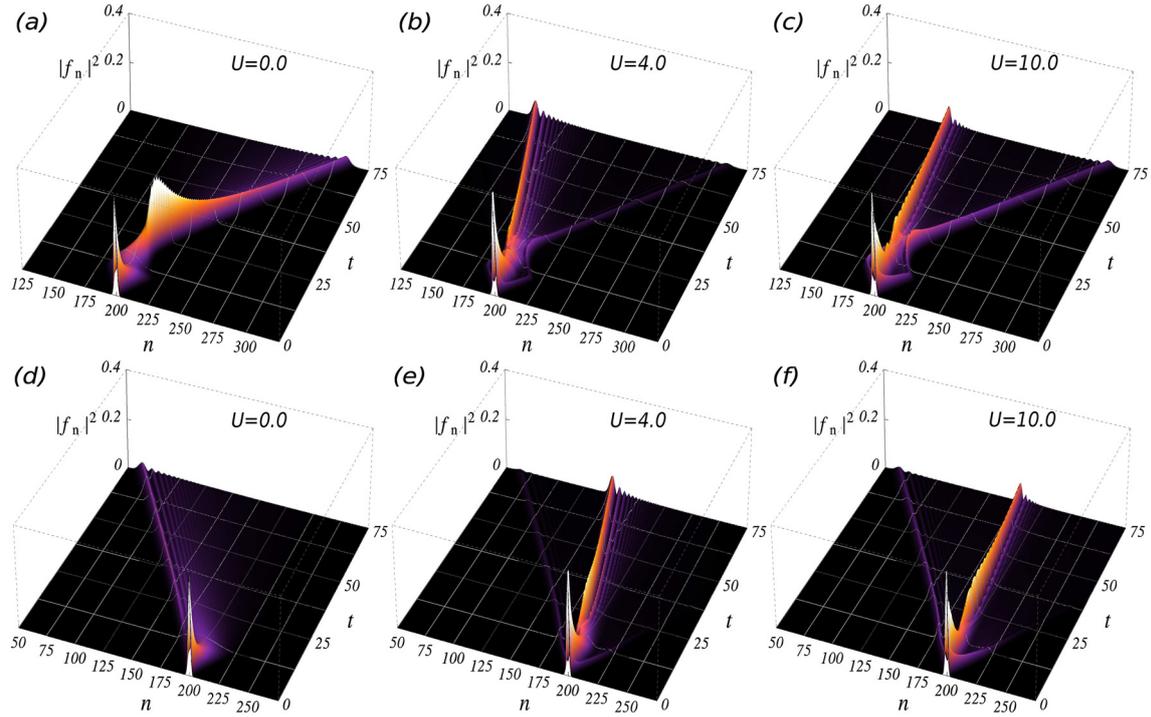


Fig. 3. Time evolution of the one-particle wave function profile in the absence of interaction ($U = 0.0$), intermediate ($U = 4.0$) and strong particle–particle interaction ($U = 10.0$). Electric pulse applied at $\tau = 10$ time units whose resulting impulse are: top panels $I = 5\pi/4$ and bottom panels $I = \pi/3$. While $U = 0.0$ results in a behavior consistent with the single-particle formalism, the interaction induces a competition of bound-pair and unbound states, which associated with the electric pulse, splits the wave-packet into two parts. Both components (bound-pair and unbound states) perform an unidirectional transport, but may propagate along (a–c) opposite or (d–f) the same direction.

A similar behavior was reported for correlated bosons in optical lattices in the presence of doubly modulated AC-fields [35]. The on-site interaction and the lattice shaking displays independent modulating frequencies, that when properly adjusted can offer a bifurcating quantum motion of pair correlated particles propagating in opposite directions. However, we show that both components (bound-pair and unbound components) performs an unidirectional transport, but can propagate in the opposite [see Fig. 3(a–c)] as well as the same [see Fig. 3(d–f)] direction. The drift velocity of each front can be analytically determined by the semi-classical description of the impulse dependence of the centroid velocity.

The previous results suggest that the connection between interaction strength and the amplitude of the wave-packet fractions is related to competitive character between bound-pair and unbound states. For intermediate values of inter-particle interaction, it is observed a strong coupling between the particles, in way that the unbound fraction of the wave-packet is much smaller than the other. This feature indicates that states are more strongly entangled in the regime of intermediate interaction strengths. In order to quantify the degree of entanglement of the two-particle wave function, we compute the purity function defined as

$$P(t) = \text{tr} \rho_1^2(t), \quad (10)$$

where $\rho_1(t)$ is the reduced density matrix for particle 1 obtained after taking the partial trace over the states of particle 2 [46]. In Fig. 4a it is shown the purity computed after 100 time units ($P(t_f)$) versus the interaction strength (U) for initially close particles ($d_0 = 0$) in systems with different applied field pulses. For a pure quantum state, the density matrix is a projector, so that the purity function $P(t) = 1$ and the two particles are not quantum entangled. As the interaction between particles is increased, an enhancement in the degree of entanglement ($P(t_f) \rightarrow 0$) is observed. However, this behavior is not monotonic. After an in-

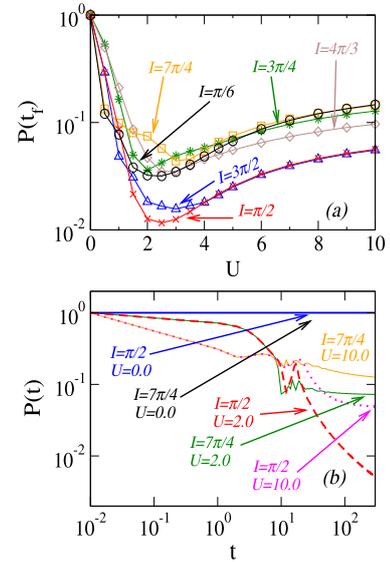


Fig. 4. (a) Purity function computed ($P(t_f)$) after 100 time units versus interaction (U) for distinct applied electric pulses. The degree of entanglement displays a non-monotonic dependence on U and is greater for electric pulses which promote higher velocities of the unbound branch. (b) For an intermediary interaction strength the time evolution of quantum purity function indicates that the wave-packet develops a continuously increasing degree of quantum entanglement when the electric pulse promote higher velocity of the unbound branch.

termediate interaction strength, the degree of entanglement is reduced. This non-monotonic behavior is related to the competitive character described above, where the interaction favors the coherent hopping associated with bound states while the wave-packet widening decreases the double occupancy probability. We also note that the degree of entanglement is larger for electric pulses that

promote larger velocities at the unbound branch ($I = \pi/2, 3\pi/2$). Other settings of electrical pulses display similar aspects to those presented by $I = 7\pi/4, \pi/6, 3\pi/4, 4\pi/3$. The Fig. 4b displays the time evolution of the purity function for $U = 0, 2, 10$ and electric field impulses $I = 7\pi/4, \pi/2$. While the two particles are not entangled for $U = 0$, for $U = 2$ and $I = \pi/2$ the purity function continuously decreases in time. This feature indicates that the wave-packet develops quantum entanglement over a continuously growing chain segment. In this configuration the electric pulse promotes the largest velocity of the unbound branch. In contrast, for other settings, the degree of entanglement quickly saturates, reinforcing the fact that unbounded states plays a more significant role in the wave-packet dynamics in the regime of very strong interactions.

4. Summary and conclusions

In summary, we introduced a scheme to generate and manipulate spatially entangled two-particle states by driving them using a pulsed electric field. More specifically, our results showed that bound-pair and unbound states of an initially entanglement wave-packet can be controlled separately. This allows to split the wave-packet into two fractions that develops unidirectional transport, with speed and direction of each branch externally controlled by the pulsed field. The electric field can be adjusted in order to make these two components (bound-pair and unbound states) propagate either in the same or opposite directions. The amplitude of each mode is related to the degree of entanglement of the two particles, which presents a non-monotonic dependence with the interaction between particles. This behavior comes from the competitive character between bound-pair and unbound states. While the interaction favors the coherent hopping associated with bound-pair states, widening decreases the double occupancy probability coming from the superposition with unbound states. This competition leads to an optimal range of couplings to obtain a strongly correlated dynamics of the two interacting particles. Our analysis is based on observables that can be experimentally verified, such as the wave-packet profile [14] and quantum purity [46]. Thus, these recent experimental achievements strongly indicate that the scheme proposed here is feasible in systems of ultracold atoms trapped on one-dimensional optical lattices under a tilting pulse. We hope that our work may impel further investigations aiming the manipulation of entangled particles in low-dimensional systems.

5. Acknowledgments

We would like to thank M. L. Lyra for critical comments and suggestions. This work was partially supported by the Alagoas

State research agency FAPEAL (grant number 2011.0908.011.0025.0087).

References

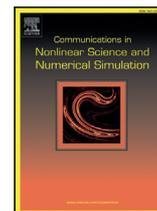
- [1] J. Kempe, *Contemp. Phys.* 44 (2003) 307.
- [2] N. Shenvi, J. Kempe, K. Birgitta Whaley, *Phys. Rev. A* 67 (2003) 052307.
- [3] S. Chakraborty, L. Novo, A. Ambainis, Y. Omar, *Phys. Rev. Lett.* 116 (2016) 100501.
- [4] R. Portugal, *Quantum Walks and Search Algorithms*, Springer, New York, 2013.
- [5] Motohiko Ezawa, *Phys. Lett. A* 375 (2011) 3610.
- [6] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd, A. Aspuru-Guzik, *J. Chem. Phys.* 129 (2008) 174106.
- [7] A. Schreiber, et al., *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 050502.
- [8] M. Gräfe, et al., *Sci. Rep.* 2 (2012) 562.
- [9] Hagai B. Perets, et al., *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 170506.
- [10] A. Peruzzo, et al., *Science* 329 (2010) 1500.
- [11] Jiangfeng Du, et al., *Phys. Rev. A* 67 (2003) 042316.
- [12] K. Manouchehri, J.B. Wang, *J. Phys. A, Math. Theor.* 41 (2008) 6.
- [13] M. Karski, et al., *Science* 325 (2009) 174.
- [14] P.M. Preiss, et al., *Science* 347 (2015) 1229.
- [15] Yue Yin, D.E. Katsanos, S.N. Evangelou, *Phys. Rev. A* 77 (2008) 022302.
- [16] S.R. Jackson, T.J. Khoo, F.W. Strauch, *Phys. Rev. A* 86 (2012) 022335.
- [17] L. Wang, Li Wang, Y. Zhang, *Phys. Rev. A* 90 (2014) 063618.
- [18] Qinghao Wang, Zhi-Jian Li, *Ann. Phys.* 373 (2016) 1.
- [19] A.S. Peixoto, W.S. Dias, *Solid State Commun.* 242 (2016) 68.
- [20] P.E. de Brito, E.S. Rodrigues, H.N. Nazareno, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 014301.
- [21] Seth Lloyd, *J. Phys. Conf. Ser.* 302 (2011) 012037.
- [22] Y. Aharonov, L. Davidovich, N. Zagury, *Phys. Rev. A* 48 (1993) 1687.
- [23] E. Farhi, S. Gutmann, *Phys. Rev. A* 58 (1998) 915.
- [24] A.M. Childs, D. Gosset, Z. Webb, *Science* 339 (2013) 791.
- [25] S.D. Berry, J.B. Wang, *Phys. Rev. A* 83 (2011) 042317.
- [26] J.K. Gamble, M. Friesen, D. Zhou, R. Joyn, S.N. Coppersmith, *Phys. Rev. A* 81 (2010) 052313.
- [27] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 155124.
- [28] W.S. Dias, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Lett. A* 374 (2010) 4554.
- [29] G. Corrielli, et al., *Nat. Commun.* 4 (2013) 1555.
- [30] Q. Thommen, J.C. Garreau, V. Zehnle, *Phys. Rev. A* 65 (2002) 053406.
- [31] V.V. Ivanov, A. Alberti, M. Schioppo, G. Ferrari, M. Artoni, M.L. Chiofalo, G.M. Tino, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 043602.
- [32] E. Haller, R. Hart, M.J. Mark, J.G. Danzl, L. Reichsollner, H.C. Nagerl, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 200403.
- [33] R.A. Caetano, M.L. Lyra, *Phys. Lett. A* 375 (2011) 2770.
- [34] W.S. Dias, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. A* 93 (2016) 023623.
- [35] Yi Zheng, Shi-Jie Yang, *New J. Phys.* 18 (2016) 013005.
- [36] Taeko I. Urano, Hiro-o Hamaguchi, *Chem. Phys. Lett.* 195 (1992) 287.
- [37] F.L. Moore, J.C. Robinson, C.F. Bharucha, B. Sundaram, M.G. Raizen, *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 4598.
- [38] Q. Hu, et al., *Phys. Rev. E* 71 (2005) 031914.
- [39] G. Dong, W. Lu, P.F. Barker, *Phys. Rev. A* 69 (2004) 013409.
- [40] S.J. Beebe, Karl H. Schoenbach, *J. Biomed. Biotechnol.* 2005 (2005) 297.
- [41] S. Arlinghaus, M. Holthaus, *Phys. Rev. A* 84 (2011) 063617.
- [42] A.R.C.B. da Silva, F.A.B.F. de Moura, W.S. Dias, *Solid State Commun.* 236 (2016) 12.
- [43] J.F. Weisz, F. Claro, *J. Phys. Condens. Matter* 15 (2003) 3213.
- [44] D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 2607.
- [45] W.S. Dias, M.L. Lyra, *Physica A* 411 (2014) 35.
- [46] Rajibul Islam, et al., *Nature* 528 (2015) 77.

ANEXO C – Creation and mobility of self-trapped electronic states in nonlinear chains



Contents lists available at ScienceDirect

Commun Nonlinear Sci Numer Simulat

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cnsns

Research paper

Creation and mobility of self-trapped electronic states in nonlinear chains

A.R.C. Buarque, W.S. Dias*

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil



ARTICLE INFO

Article history:

Received 24 December 2017

Revised 29 March 2018

Accepted 4 April 2018

Available online 10 April 2018

2010 MSC:

81V99

70K99

Keywords:

Self-trapped

Nonlinear

Electric field

Electron-lattice

ABSTRACT

We study the formation and mobility of self-trapped electronic states in a nonlinear one-dimensional lattice subjected to an electric-field. The nonlinearity arises from the electron-lattice coupling and the electric field is time-dependent. We show that the nonlinearity is a mechanism able to provide motion to the centroid of a delta-like wave-packet when subjected to an electric field, in contrast with the behavior of linear systems. With the co-existence of the electric field and electron-lattice interaction, the constitution of mobile self-trapped states is possible. The phase diagram reveals a rich phenomenology in which the mobility of self-trapped electronic states can exhibit an unidirectional branch migrating to the left or the right side of the chain. For weak nonlinearities, an analytical expression obtained from a semi-classical approach describes the dynamics of self-trapping states. In a strong electron-lattice regime, the wave-packet develops a self-trapped regime in which it remains fully localized at the initial site. Thus, we offer the proper tuning of electric field for the management of the creation and mobility of self-trapped electronic states through the lattice.

© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Self-trapped states in periodic systems have received extensive attention of the scientific community, with studies covering different branches of science such nonlinear optics [1–4], mechanics [5,6], electrics [7,8], quantum mechanics [9,10], biology [11,12] and solid state physics [13,14]. A common feature in many of these systems is the presence of nonlinearity. In optical media for example, nonlinearity has been associated to the refractive index which displays a dependence with the intensity of the optical field [1–4]. On the other hand, the static and dynamical properties of a Bose–Einstein condensate can be described by means of an effective mean-field equation, whose nonlinearity is related to interatomic interactions [9,10].

Restricting to the charge transport, self-trapped states arises from the lattice vibrations [11–49]. For example, many biological phenomena are related to electron transfer through molecular structures, whose mechanism of electron motion has been associated to the interaction between electrons and displacements of the equilibrium positions of molecules [11,12]. This interaction promotes an electron-soliton formation, stabilizes its motion and favors conductivity through molecules [11,12,15–18]. The charge transport in polymers has also been associated to self-trapped states like solitons [13,14,19–23], polarons [24–31] or bipolarons [32–34]. Aiming to explain the conductivity behavior of the *trans*-polyacetylene [14], Su, Schrieffer and Heeger (SSH) proposed a simple one-dimensional tight-binding model which includes

* Corresponding author.

E-mail address: wandearley@fis.ufal.br (W.S. Dias).

an electron-lattice interaction [13,14]. This interaction is related to the dependence of the transfer integral with the spacing and relative orientations of adjacent sites. Since then, the SSH model has been used in numerous investigations concerning the transport properties in polymers [19–34]. Besides the charge coupling to the acoustic modes, the charge can interact with internal (intra-molecular) vibrations, whose electron-lattice coupling arises from the overall modulations of the site energy. This interaction is described via the molecular crystal model of Holstein [35,36] and also reveals the existence of polarons, which are commonly characterized as large and small polarons due to the comparison between its linear dimension and the lattice spacing [35–47]. The addition of interaction between charges allows the formation of a bi-polaron, where properties such as formation and stability have been investigated [48,49].

In face of the great interest in developing and improvement of electrical and electronic devices, it is crucial to understand the underlying mechanisms of charge transport under external fields. Likewise, studies of self-trapped states in periodic systems subjected to external fields have been reported [22–34,40,43–47]. For a smooth turn-on of electric field, for example, solitons [22,23], polarons [24–26,29–31] or bi-polarons [26,32–34] are accelerated at first and then move with a constant velocity as one entity consisting of both charge and lattice deformation. Under this circumstance, the acoustic polaron dynamics in a system of coupled polymer chains shows to be strongly dependent on the strength of the electric field, where three different cases have been identified in which the polaron reaches a chain end and is scattered to the surrounding chains [24]. A smooth turn-on and sudden turn-off of the electric field allowed to understand that the lattice oscillation behind the polaron is nothing but a breather which bears the increased energy due to the electric field acting on the polaron, so that the polaron can move at a constant speed even in the presence of an electric field [26]. Another study reported that a slow-applied field is favorable for the formation of a polaron in a chain whose charge interact with acoustic modes. However, it suppresses the nonlinear increase in the electronic mobility as it results from a fastly-applied field [29]. The polaron dynamics in DNA molecules subjected to a uniform electric field exhibits coherent oscillations, whose frequency is close to the Bloch frequency provided that the carrier-lattice coupling is not large [43,44]. Taking fully into account quantum effects, an Holstein polaron driven by a constant electric field can leave a trail of phonon excitations absorbing the excess energy achieved from the electric field [47]. Nonlinearity has also induced mobile self-trapped states in a semi-discrete 2D system driven by the gradient potential.

In this work we aim to contribute with a detailed description of the self-trapped electronic states in a nonlinear one-dimensional lattice subjected to an electric-field. The nonlinearity arises from the intramolecular vibrations, whose nonlinear parameter expresses the electron-lattice coupling. Motivated by the above studies, we set the electric field to smoothly turn-on and turn-off, with short-duration (see Section 2). With the system ruled by a set of nonlinear Schrödinger equations, we concentrated in follow the time evolution of an initially fully localized wave-packet. The results (see Section 3) report the nonlinearity as a mechanism able to provide motion to the centroid of a delta-like wave-packet when subjected an electric field, contrary to the description for linear systems [50,51]. Self-trapping electronic states are detected, whose mobility are described by a phase diagram. Among the five defined regimes, mobile self-trapped states exhibiting branches with unidirectional dynamics to both sides of chain are reported. In another regime, the wave-packet becomes self-trapped, remaining fully localized at the initial site. Thus, we offer the proper tuning of electric field in order to promote the creation and mobility of self-trapped electronic states through the lattice. In Section 4 we present our conclusions and point out recent experimental achievements which suggest cold atoms trapped in optical lattices as able to map the scheme proposed here.

2. Model and formalism

Our model consists of an electron moving in a regular one-dimensional chain with N sites driven by an external field $E(t)$. The chain consists of diatomic molecular sites, where each site have a single vibrational degree of freedom. By assuming that the electron-lattice interaction depends only on the vibrational coordinate of the occupied site, i.e. the on-site potentials are modulated by intramolecular vibrations, the total Hamiltonian can be written as

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_n \left(\frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_o^2 v_n^2 \right) \\
 & + \sum_n J (c_{n+1}^\dagger c_n + c_{n-1}^\dagger c_n) \\
 & + \sum_n (\epsilon_n - eE(t)na + \gamma_n v_n) c_n^\dagger c_n
 \end{aligned} \tag{1}$$

Here c_n^\dagger (c_n) is the creation(annihilation) operator for an electron of charge e at site n . The internal vibration coordinate of the n th unit cell is represented by v_n (intra-molecular separation from its equilibrium value), while P_n is their conjugated momentum. M is the mass of the unit cell and ω_o is the harmonic oscillation frequency. J is the bare hopping amplitude, γ_n constitutes the constant electron-lattice interaction and ϵ_n is the on-site energies.

In order to follow the time evolution of a one-electron wave-packet, we solve the time dependent Schrödinger equation by expanding the wave-function in the Wannier representation $|\Psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t)|n\rangle$ and derive the equations

$$\frac{d^2 v_n(t)}{dt^2} + \omega_o^2 v_n(t) = \gamma |\psi_n(t)|^2 \tag{2}$$

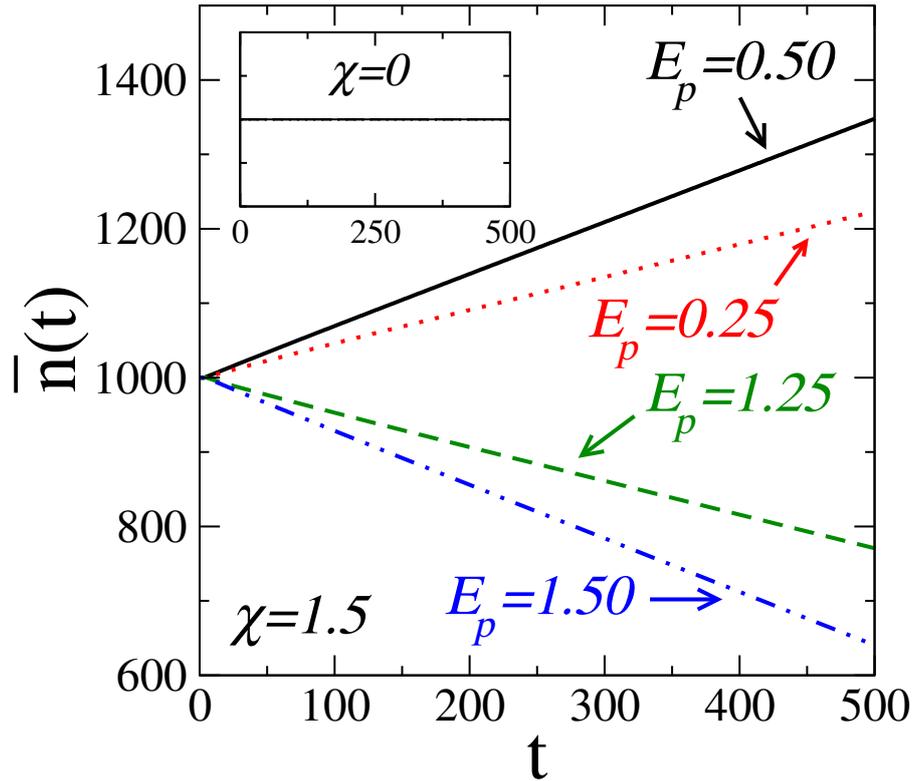


Fig. 1. Time evolution of the average position (wave-packet centroid) for four settings of electric field ($E_p = E_0/\sqrt{\pi}$) applied at $\tau = 3.5$ time units. The nonlinearity is a mechanism able to provide motion to the centroid of a delta-like wave-packet when subjected to an electric field, in contrast with the description of linear systems.

$$i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} = [\epsilon_n - eE(t)na + \gamma v_n]\psi_n(t) + J \sum_m \psi_m(t), \quad (3)$$

Within a nearest-neighbor approximation, we assume that the molecular vibrations on the lattice sites attain equilibrium on a time smaller than the scale of time for the evolution of the electronic wave-packet. Thus, we obtain

$$i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} = \sum_n J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + \chi |\psi_n(t)|^2 \psi_n(t) + \epsilon_n \psi_n(t) - eE(t)na\psi_n(t). \quad (4)$$

Here, $\chi = \gamma^2/\omega_0^2$ represents the effective local electron-lattice coupling. The on-site energies were taken as the reference energy ($\epsilon_n = 0$) and time is expressed in units of \hbar/J . Motivated by investigations of self-trapped states subjected to an setup of smooth turn-on electric field [22–26,29–34], we set the external field as a Gaussian pulse [52], which can be expressed as

$$E(t) = E_0 \exp\left[-\frac{(t - \tau)^2}{4\sigma^2}\right]. \quad (5)$$

Here, σ controls the duration of each pulse and τ is the time of reference. In all calculations, we take $\tau = 3.5$, $\sigma = 0.5$ and various values of the electric field E_0 . The following description is independent of τ , as long as it is adjusted to initial stages of the time-evolution and allow the electric field start from zero. By using units such that $\hbar = J = e = a = 1$, the above set of equations was solved numerically by using the fourth-order Runge-Kutta method with step-size $\leq 10^{-3}$ in order to keep the wave-function norm conservation ($1 - \sum_n |\psi_n(t)|^2 \leq 10^{-13}$) along the entire time interval considered. We consider the electron initially localized at the center of chain (i.e. $\psi_n = \delta_{n,N/2}$). Through the above-described approach, we computed typical quantities that can bring information about the wave-packet time-evolution, as it will be detailed below.

3. Results and disussion

By adjusting the electric field for $E_0/\sqrt{\pi} = E_p = 0.25, 0.5, 1.25, 1.5$, we show in Fig. 1 the time evolution of the average position of the electron (centroid),

$$\bar{n}(t) = \sum_n n |\psi_n(t)|^2. \quad (6)$$

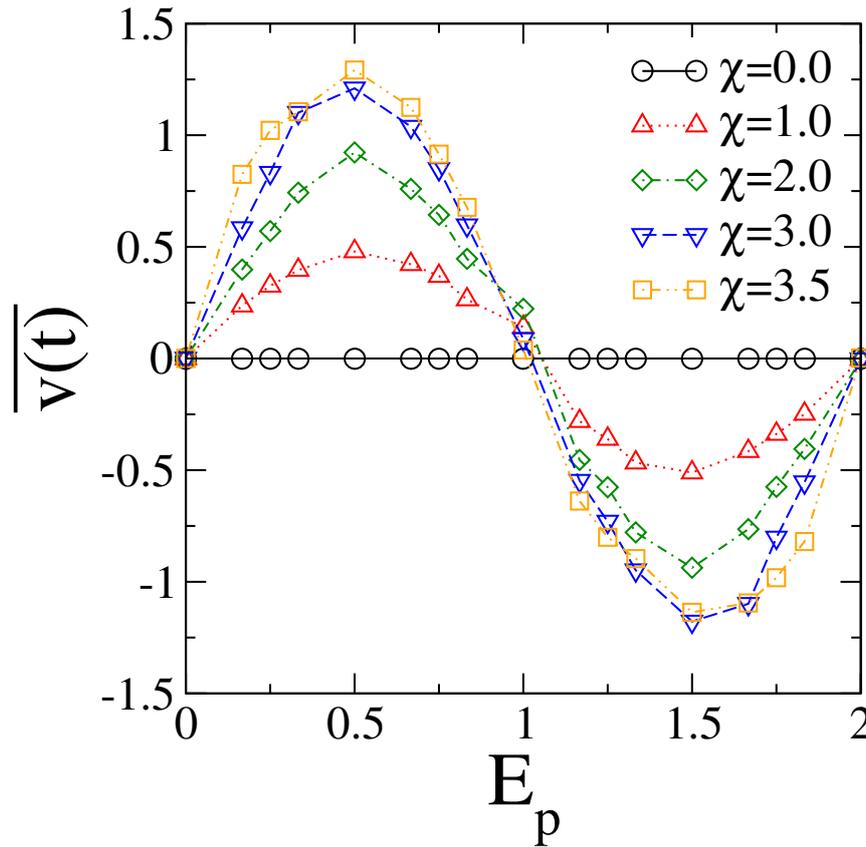


Fig. 2. Electric field E_p dependence of the centroid velocity for $\chi = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 3.5$. With electron-lattice coupling, the centroid velocity shows a sine-like dependence with respect to the electric field. An analytical expression obtained from a semi-classical approach expresses the source of this dependence (see text).

In absence of lattice vibrations, it is known that the centroid of tightly bound electrons in a 1D crystalline lattice subjected to an electric-field does not change its position in time when the electron is initially localized at a single site [50,51]. This behavior is recovered in inset of Fig. 1, where the nonlinear parameter is $\chi = 0.0$. Since the average velocity is proportional to the average value of the kinetic operator of the initial state, this aspect becomes characteristic for delta-like initial wave-packets. On the other hand, the main panel reveals that the electron-lattice coupling $\chi = 1.5$ induces an unidirectional motion of the centroid. With a co-existence of the electric field and electron-lattice interaction, the nonlinearity acts by balancing the energy difference between neighboring sites, making them dynamically degenerate and stimulating the hopping among themselves. The described dynamics is clearly dependent of the electric field, in which a counter-intuitive behavior is observed. As we increase the electric field, the velocity of the centroid is modified, and can even change the migration direction.

In order to better understand the wave-packet dynamics, we collected the time-evolution of centroid for different electric field settings and computed its average velocity $\overline{v(t)}$. In Fig. 2 we show $\overline{v(t)}$ versus $E_p = E_0/\sqrt{\pi}$ in systems whose electron-lattice coupling is $\chi = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 3.5$. In absence of electron-lattice coupling, the result are corroborated by previous studies [50,51]. However, for nonvanishing χ , the plot reveals a sine-like dependence of the average centroid velocity with respect to the electric field. This behavior can be understood keeping in mind that the group velocity of the wave-packet is given by the gradient of the dispersion relation $v(k) = \frac{1}{\hbar} \partial \mathcal{E}(k) / \partial k$. While the electron-lattice coupling is not sufficiently stronger, the background linearity has a ruling influence and the electronic velocity is approximately given by $v(k) = -\frac{2Ja}{\hbar} \sin(ka)$. Since the electric field $E(t)$ drives the time evolution of the linear momentum governed by $d(\hbar k)/dt = eE(t)$, we have as result

$$v(k) = -\frac{2Ja}{\hbar} \sin\left(k_0 a + \frac{ea}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E(t) dt\right) \quad (7)$$

Therefore, we see that the electric field modifies the initial wave-vector of the wave-packet. The wavepacket velocity depends only on the momentum of the force (integral of the force on the time). This dependence is also observed by using a purely quantum mechanical approach [53], corroborating our results. This result holds for any form of the driving pulse, including the limiting case of a delta-functional one. However, by acting mutually with the electron-lattice coupling, the electric field can also arrange it into a mobile self-trapped states. This statement is verified in Fig. 3, where we show the time evolution of the wave function profile for two values of the electric field already used in

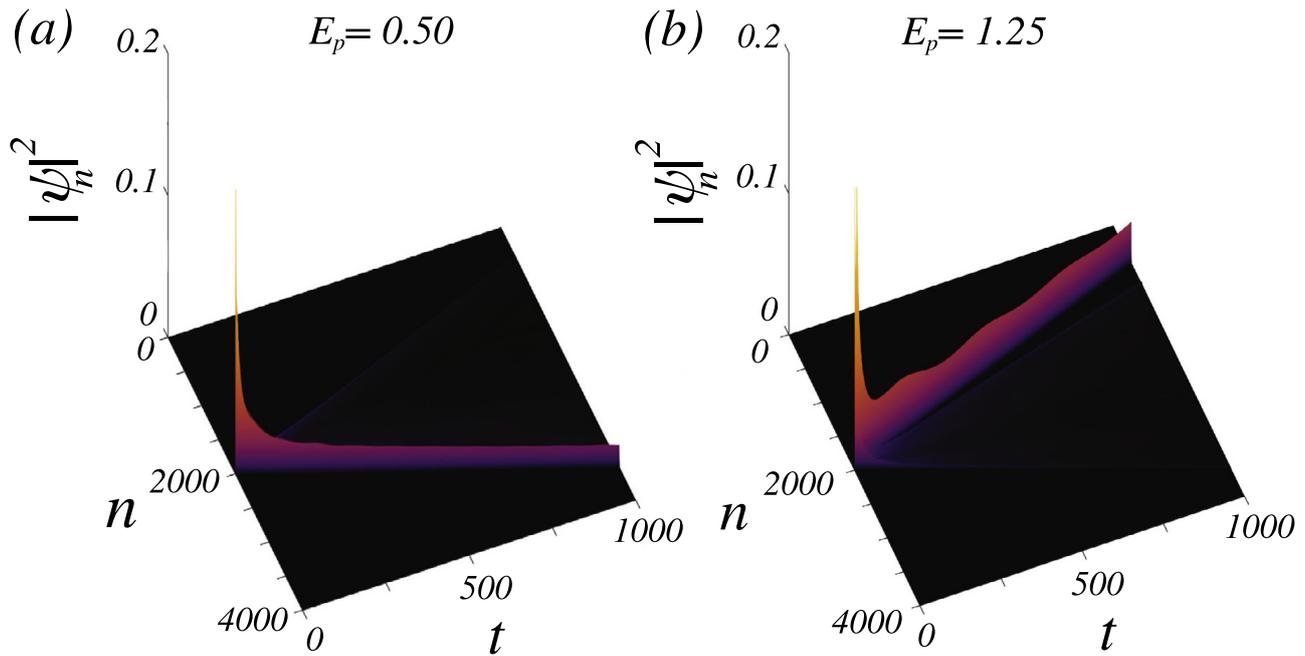


Fig. 3. Time evolution of the wave function profile for two values of electric field (a) $E_p = 0.5$ and (b) $E_p = 1.25$, with electron-lattice coupling $\chi = 1.5$. For a weak nonlinearity, the mutual action of electric field and electron-lattice coupling arranges the electronic wave-packet into mobile self-trapped states, whose direction and velocity are adjusted by the electric field.

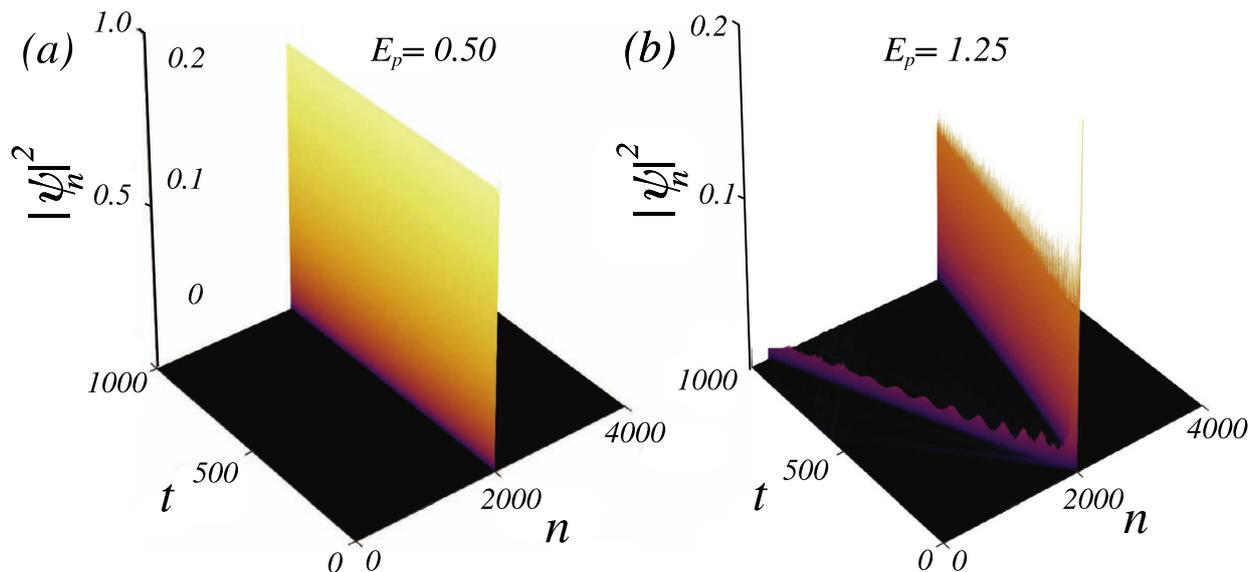


Fig. 4. Time evolution of the wave function profile for the same values of the electric field E_p used in Fig. 3, but with electron-lattice coupling $\chi = 6.0$. While the wave-packet remains fully localized in its initial position for an electric field $E_p = 0.5$, two mobile branches with opposite orientations is observed for $E_p = 1.25$. For a strong electron-lattice coupling, results suggest the existence of a critical electron-lattice coupling (χ_c) that separates regimes where mobile branches are observed from the regime in which the wave-packets is fully trapped at the initial site. Moreover, χ_c depends on the electric field.

Figs. 1 and 2. The electron-lattice coupling for both configurations are $\chi = 1.5$, while the electric-field values are (a) $E_p = 0.5$ and (b) $E_p = 1.25$. In both settings a soliton-like formation is observed, whose mobility is consistent with the electric field value and the semi-classical analysis described above. These results are consistent with the references [22–26,29–34,54], where the existence of mobile self-trapped states (solitons or polarons) has been credited to the electron-lattice coupling or the nonlinearity coefficient.

It is well known that a sufficiently strong electron-lattice coupling induces a self-trapping of wave-packet in which the electron remains strongly trapped in its initial position. In this case, the spread/enlargement or mobility of the wave-packet is suppressed. Here, we show in Fig. 4 the time evolution of the wave function profile for the same values of the electric field used in Fig. 3, but for $\chi = 6.0$. It becomes evident the behavioral change of the system for strong electron-lattice coupling. While the wave-packet remains fully localized in its initial position for an electric field $E_p = 0.5$, two mobile branches with opposite orientations are observed for $E_p = 1.25$. This behavior suggests the existence of a critical electron-lattice coupling

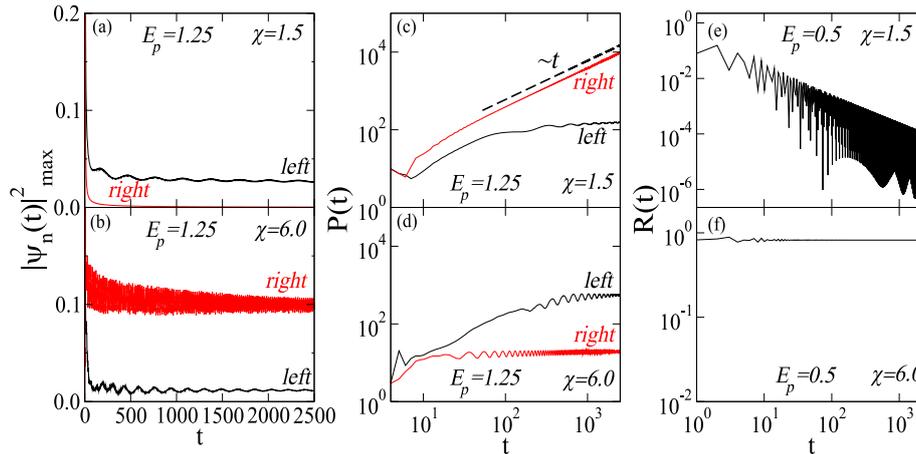


Fig. 5. Typical quantities that can bring information about the possible self-trapping of the wave-packet, its spacial extension and mobility. (a-b) Maximum wave function $|\psi_n(t)|_{\max}^2$ on both sides of the chain (with respect to the initial wave-packet center) subjected to an electric field $E_p = 1.25$ and (a) $\chi = 1.5$ and (b) $\chi = 6.0$. The configuration (a) suggests a soliton-like branch, while (b) suggests two branches. (c-d) Participation function $P(t)$ in the both sides of the chain for the same configuration of (a-b), respectively. Results corroborate the behavior described by $|\psi_n(t)|_{\max}^2$. (e-f) Return probability of the wave-packet subjected to an electric field $E_p = 0.5$ and (e) $\chi = 1.5$ and (f) $\chi = 6.0$. As we increase the nonlinear coupling, the wave-packet becomes fully trapped at the initial site.

(χ_c) that separates regimes where mobile branches are observed from the regime in which the wave-packet is fully trapped at the initial site. Moreover, the results point out that this χ_c depends on the electric field.

Aiming a better characterization of the dynamic behavior of the wave-packet, we computed other typical quantities that can bring information about the possible self-trapping of the wave-packet and its spacial extension. The participation function,

$$P(t) = 1 / \sum_n |\psi_n(t)|^4, \quad (8)$$

gives an estimate of the number of sites over which the wave packet is spread at time t . The return probability,

$$R(t) = |\psi_{N/2}(t)|^2, \quad (9)$$

gives the probability of finding the electron in the position corresponding to the center of the initial wave-packet. In the long-time regime $R(t) \rightarrow 0$ means that the electronic wave function escapes from its initial location. Conversely, the return probability saturates at a finite value for a localized or a wave-packet self-trapped at the initial site.

In Fig. 5 we show some examples by using the above quantities. The time evolution of the maximum value of $|\psi_n(t)|^2$ for the left and right sides of the chain are shown in Fig. 5a-b. This quantity provides an estimate about the existence of self-trapped states. Configurations are the same used in Figs. 3b and 4b, respectively. In Fig. 5a we see only the left branch remaining constant over time after an initial transient, while the left and right branches survive in Fig. 5b. This behavior corroborates the previous description (see Figs. 3b and 4b). Still with this setting, we show in Fig. 5c and d the time evolution of the participation function computed for the left and right sides of the chain. For $\chi = 1.5$ the left branch displays a finite participation number, while the right branch exhibits a participation number growing linearly in time. This description is consistent with previous analysis (see Fig. 3b). On the other hand, for $\chi = 6.0$ both left and right sides display finite participation numbers, thus expressing the existence of self-trapped branches. In Fig. 5e and f we show the time evolution return probability for a setup whose electric field is $E_p = 0.5$ and (e) $\chi = 1.5$ and (f) $\chi = 6.0$. Configurations are the same used in Figs. 3a and 4a, respectively. While the probability of finding the wave-packet in its initial position vanishes as t evolves (for $\chi = 1.5$), the amplitude remains finite and close to unity for a $\chi = 6.0$ Fig. 6.

Finally, aiming to give an extensive description about the dynamics behavior of wave-packet we plot the E_p vs χ phase diagram. Color describes the magnitude of $|\psi_n(t)|_{\max}^2$ in the asymptotic regime. Filled circles are numerically obtained thresholds which separate the five different regimes I–V. In (I) the wave-packet do not exhibits self-trapped states. It spreads developing two fronts that propagate in opposite directions over the lattice. In (II) the wave-packet exhibits one branch with mobile self-trapped states moving to the right side of the lattice. In (III) the wave-packet exhibits one branch with mobile self-trapped states moving to the left side of the lattice. The dynamics behavior described by these regimes are in agreement with the semi-classical analysis displayed above. The spreading of the wave-packet close to $E_p = 1.0$ is related to the weak impulse coming from electric field. Soliton-like branches are also absent for very weak nonlinearity.

Due to the quite sensitivity to configurational changes, the regime (IV) was labeled as undefined. Unlike the previous phases, we have here a discontinuous behavior where a minimum change of parameters can significantly modify the wave-packet dynamics. We found mobile self-trapped states displaying an unidirectional dynamics to left or right sides, two mobile branches with the same or opposite directions, as well as the wave-packet spreading over lattice. This undefined behavior has been shown in other nonlinear systems [55,56]. In phase (V) the wave-packet remains fully localized at the

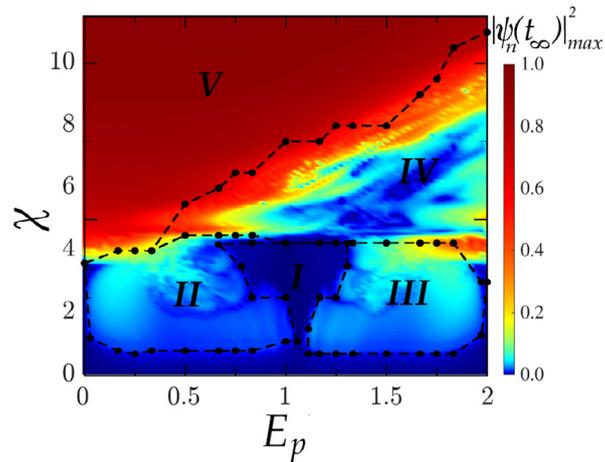


Fig. 6. E_p vs χ phase diagram, whose color describes the magnitude of $|\psi_n(t)|_{\max}^2$ in the asymptotic regime. Filled circles are numerically obtained thresholds which separate the five different regimes I–V. (I) Wave-packet does not exhibit self-trapped states; (II–III) Wave-packet exhibits one branch with mobile self-trapped states moving to the right/left side of lattice, respectively. (IV) Regime labeled as undefined, since a minimum change of parameters can significantly modify the wave-packet dynamics. (V) The wave-packet remains fully localized at the initial site.

initial site. In absence of electric field, the estimated value of χ_c is corroborated by previous studies [57–59]. As we increase the electric field strength, larger values of χ are required to get the degeneracy between neighbouring sites. Thus, the χ_c delimiting the phase (V) grows with E_p , a behavior similar to that described by a particle in a nonlinear chain under the action of dc field [55].

4. Summary and conclusions

In summary, we introduced a scheme to generate mobile self-trapped electronic states in a nonlinear one-dimensional lattice by using short electric field pulses. The nonlinearity arises from the lattice vibrations, whose nonlinear parameter χ describes the electron-lattice coupling. Our results showed the nonlinearity as an mechanism able to provide motion to the centroid of a delta-like wave-packet when subjected to an electric field, contrasting with the description of linear systems [50,51]. Whereas the action of a constant external force induces the wave-packet to exhibit well-defined oscillations with constant amplitude (well known as Bloch Oscillations), the time-dependent force changes the wave-vector within the dispersion relation only while the force is nonvanishing. This implies that the final momentum of the particle depends on the integral of the force over time, where its centroid tends to show a unidirectional motion after short electric field pulses. With the mutual existence of the electric field and electron-lattice interaction, the nonlinearity acts by balancing the energy difference between neighboring sites, making them dynamically degenerate and stimulating the hopping among them. After studying many settings of electric fields and electron-lattice couplings, a phase diagram was formulated, which revealed a rich phenomenology allied to five regimes of wave-packet dynamics. Within a weak electron-lattice coupling, mobile self-trapped electronic states are ruled by an analytical expression obtained from a semi-classical approach. Due to changes of the initial wave-vector promoted by the electric field, the wave-packet may exhibit a self-trapped branch migrating to the left or right side of chain. Furthermore, an undefined regime was found where a minimum change of parameters can significantly modify the wave-packet dynamics. In a strong electron-lattice regime, the wave-packet remains fully localized at the initial site. The critical strength of electron-lattice coupling delimiting this phase grows with the electric field strength, since the increase of the field amplitude requires larger values of electron-lattice coupling to get the degeneracy between neighbouring sites. To conclude, ultracold atomic gases trapped in optical lattices have proven to be able to mimic the electron dynamics in a solid. Thus, with the recent experimental achievements in this class of systems, we believe that the scheme proposed here is feasible. This conjecture is related to recent experiments that have reported the capability of observing coherent atomic motion over macroscopic distances while subjected to the action of a time-dependent field [60,61]. Furthermore, the nonlinearity, coming from the mean-field term (proportional to the particle density), can be tuned by Feshbach resonances [62].

Acknowledgments

We would like to thank M. L. Lyra for critical comments and suggestions. This work was partially supported by CAPES (Federal Brazilian Agency) and FAPEAL (Alagoas State agency).

References

- [1] Chen W, Mills DL. *Phys Rev Lett* 1987;9:8.
- [2] 33 DN, Joseph RI. *Opt Lett* 1988;9:8.

- [3] Feng J. *Opt Lett* 1993;9:9.
- [4] Leblond H, Kremer D, Mihalache D. *Phys Rev A* 2017;0:1.
- [5] Kenig E, Malomed BA, Cross MC, Lifshitz R. *Phys Rev E* 2009;0:0.
- [6] Malishava M. *Phys Rev E* 2017;0:1.
- [7] English LQ, et al. *Phys Rev E* 2013;0:1.
- [8] Palmero F, et al. *Phys Rev E* 2011;0:1.
- [9] Levy S, Lahoud E, Shomroni I, Steinhauer J. *Nature* 2007;0:0.
- [10] Aycok LM, et al. *PNAS* 2017;0:1.
- [11] Davydov AS. *Solitons in molecular systems*. Springer Netherlands; 1985.
- [12] Scott A. *Phys Rep* 1992;9:9.
- [13] Su WP, Schrieffer JR, Heeger AJ. *Phys Rev Lett* 1979;9:7.
- [14] Heeger AJ, Kivelson S, Schrieffer JR, Su WP. *Rev Mod Phys* 1988;9:8.
- [15] Förner W. *J Phys.* 1991; 3, 3235.
- [16] Hennig D, Chetverikov A, Velarde MG, Ebeling W. *Phys Rev E* 2007;0:0.
- [17] Ebeling W, Velarde MG, Chetverikov AP, Henning D. *Selforganization of Molecular Systems. From Molecules and Clusters to Nanotubes and Proteins*. Berlin: Springer; 2009. p. 171–98.
- [18] Brizhik LS, Piette BMAG, Zakrzewski WJ. *Phys Rev E* 2014;0:1.
- [19] Lin X, Li J, Yip S. *Phys Rev Lett* 2005;0:0.
- [20] Shin Y, Li M, Botelho AL, Lin X. *Phys Rev B* 2010;0:1.
- [21] Sales MO, de Moura FABF. *J Phys* 2014;0:1.
- [22] Ma H, Schollwöck U. *J Chem Phys* 2008;0:0.
- [23] Zhao H, Chen Y, Yan Y, An Z, Wu C. *Europhys Lett* 2012;0:1.
- [24] Johansson A, Stafström. *Phys Rev Lett* 2001;0:0.
- [25] Yu JF, Wu CQ, Sun X, Nasu K. *Phys Rev B* 2004;0:0.
- [26] Fu J, Ren J, Liu X, Liu D, Xie S. *Phys Rev B* 2006;0:0.
- [27] Junior LAR, Brito SS, Neto PHO. *Chem Phys Lett* 2016;0:1.
- [28] Li X, Chen G. *Phys Lett A* 2017;0:1.
- [29] Qiu Y, Zhu L-P. *J Chem Phys* 2009;0:0.
- [30] Yao Y, Wu YQC-Q. *J Phys* 2011;0:1.
- [31] Zhao H, Yao Y, An Z, Wu C-Q. *Phys Rev B* 2008;0:0.
- [32] Di B, Meng Y, Wang YD, Liu XJ, An Z. *J Phys Chem B* 2011;0:1.
- [33] Yan YH, Wu CQ. *Phys Lett A* 2007;0:0.
- [34] Zhao H, Chen Y, Zhang X, An Z, Wu C. *J Chem Phys* 2009;0:0.
- [35] Holstein T. *Ann Phys* 1959;9:5.
- [36] Holstein T. *Ann Phys* 1959;9:5.
- [37] Turkevich LA, Holstein TD. *Phys Rev B* 1987;9:8.
- [38] Zolotaryuk Y, Christiansen PL, Rasmussen JJ. *Phys Rev B* 1998;9:9.
- [39] Barišić OS. *Phys Rev B* 2002;0:0.
- [40] Herrera F, Krems RV. *Phys Rev A* 2011;84:051401(R).
- [41] Stojanović VM, Shi T, Bruder C, Cirac JL. *Phys Rev Lett* 2012;0:1.
- [42] Murakami Y, Werner P, Tsuji N, Aoki H. *Phys Rev B* 2015;0:1.
- [43] Díaz E, Lima RPA, Domínguez-Adame F. *Phys Rev B* 2008;0:0.
- [44] Díaz E, Domínguez-Adame F. *Chem Phys* 2009;0:0.
- [45] 33 VD, Korshunova AN. *Eur Phys J B* 2011;0:1.
- [46] Voulgarakis NK. *Physica B* 2017;519:15.
- [47] Vidmar L, et al. *Phys Rev B* 2011;0:1.
- [48] Macridin A, Sawatzky GA, Jarrell M. *Phys Rev B* 2004;0:0.
- [49] Chakraborty M, Tezuka M, Min BI. *Phys Rev B* 2014;0:1.
- [50] Domínguez-Adame F. *Eur J Phys* 2010;0:1.
- [51] 33 RA, Lyra ML. *Phys Lett A* 2011;0:1.
- [52] Dong G, Lu W, Barker PF. *Phys Rev A* 2004;0:0.
- [53] Lyra ML, Caetano RA. *Phys Status Solid B* 2017;0:1.
- [54] Driben R., Konotop V.V., Malomed B.A., Meier T., Yulin A.V.. [arXiv:1801.04220](https://arxiv.org/abs/1801.04220).
- [55] Datta PK, Jayannavar AM. *Phys Rev B* 1998;9:9.
- [56] 33 MI, Tsironis GP. *Int J Mod Phys B* 1995;9:9.
- [57] Datta PK, Kundu K. *Phys Rev B* 1996;9:9.
- [58] Dias WS, Lyra ML, de Moura FABF. *Eur Phys J B* 2012;0:1.
- [59] de Moura FABF, Gléria I, dos Santos IF, Lyra ML. *Phys Rev Lett* 2009;0:0.
- [60] Haller E, et al. *Phys Rev Lett* 2010;0:1.
- [61] Alberti A, Ivanov VV, Tino GM, Ferrari G. *Nat Phys* 2009;0:0.
- [62] Chin C, Grimm R, Julienne P, Tiesinga E. *Rev Mod Phys* 2010;82:1225.