

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

ANTHONY SALES PEIXOTO

O papel da interação local e não-local na dinâmica de dois
elétrons interagentes

Maceió – Brasil
Março de 2019

ANTHONY SALES PEIXOTO

O papel da interação local e não-local na dinâmica de dois
elétrons interagentes

Tese de Doutorado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Matéria Condensada da Universidade federal de Alagoas como requisito para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Wandearley da Silva
Dias

Maceió – Brasil
Março de 2019

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho

P379p Peixoto, Anthony Sales.

O papel da interação local e não-local na dinâmica de dois elétrons interagentes / Anthony Sales Peixoto. – 2019.

77. : il. color.

Orientador: Wandearley da Silva Dias.

Tese (doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2019.

Bibliografia: f. 65-70.

Anexo: f. 71-77.

1. Elétrons - Interação. 2. Transporte de elétrons. I. Título.

CDU: 538.915



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
TESE DE DOUTORADO

**“O papel de interação local e não-local na dinâmica de dois
elétrons interagentes”.**

por

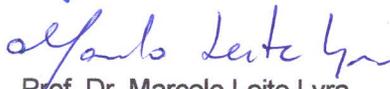
Anthony Sales Peixoto

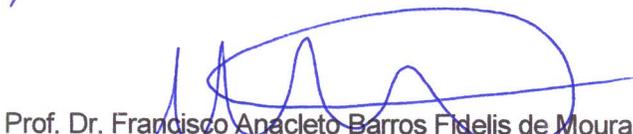
A Banca Examinadora composta pelos professores Wandearley da Silva Dias (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Jorge Anderson Paiva Ramos, da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Samuel Silva de Albuquerque, do Campus Arapiraca da Universidade Federal de Alagoas, e Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato aprovado com grau “A”.

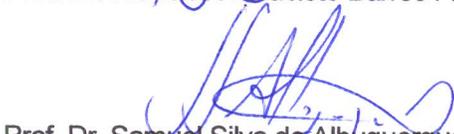
Maceió, 28 de março de 2019


Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias


Prof. Dr. Jorge Anderson Paiva Ramos


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Samuel Silva de Albuquerque

Dedico este trabalho
a meus pais, Claudio Peixoto e Simone Sales,
a minha esposa Silvia,
a minha filha Sofia,
a meus irmãos Claudio Sales e José Sales,
à memória de meus avós, José Sales, Maria Lia, Samuel Peixoto e Maura da Silva.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por me dar forças para continuar e concluir este trabalho. Agradeço às pessoas mais importantes da minha vida, minha família: meus pais, Simone e Cláudio, por todo amor e apoio e por serem exemplos de pessoas boas, honestas e esforçadas em minha vida; meus irmãos, Cláudio e Sales, pelos bons momentos.

Não poderia deixar de agradecer especialmente a duas pessoas: minha esposa, Silvia, por todo apoio, paciência e dedicação, sempre lutando ao meu lado em todos os momentos; minha filha, Sofia, pelas alegrias e inspiração.

Também agradeço a todos os colegas de curso que contribuíram direta ou indiretamente em meus anos de estudo até aqui, onde destaco alguns nomes: Helder Viana, Luiz Tavares, Elpídio, Fernando, Bruno, Elda, Zé Maria, Welynson Tiano, Ana, Débora, Jonathas Dantas, Leandro e Jeferson. Não posso esquecer também todos meus colegas de grupo, principalmente Luciano, Anderson, Michele e André, que sempre me ajudaram bastante.

Agradeço especialmente aos meus amigos, os gigantes que me permitiram enxergar mais longe, Tiago Rodrigues e Leônade Daviliano, pelo apoio e companheirismo em todos esses anos de universidade.

Agradeço também aos professores Elton Malta, Ornellas, Kléber, Socorro, Tereza, Francisco Fidelis e Marcelo Lyra pela confiança, incentivo e por todas as contribuições para minha formação profissional.

E, finalmente, agradeço a meu orientador e amigo, o professor Wandearley Dias, por toda paciência e dedicação, pela confiança e por acreditar em mim e no meu trabalho por todos esses anos. Seu conhecimento como professor e seu caráter como pessoa mostram o grande profissional com o qual tive a honra de trabalhar.

A estas pessoas agradeço por toda contribuição para minha formação profissional e pessoal.

*“Chegamos longe demais
Para deixarmos de ser quem somos
Então vamos elevar o nível
E erguer nossas taças às estrelas”*

(Get Lucky - Daft Punk ft. Pharrel Williams)

RESUMO

Nesta Tese de Doutorado apresentamos estudos relacionados à influência da interação local e de primeiros vizinhos na dinâmica de dois elétrons itinerantes em redes unidimensionais. Mais especificamente, consideramos o caso em que a interação entre os elétrons não é restrita à dupla ocupação dos elétrons em um dado sítio, mas também quando estão em sítios vizinhos. Nosso modelo é descrito por meio de uma aproximação *tight-binding*, de modo que a interação entre as partículas surge a partir de um efeito de *screening*. Assim, sempre consideramos a interação de primeiros vizinhos menor que a interação local. Nosso estudo é pautado em análises numéricas e analíticas do modelo. O emprego de técnicas numéricas de diagonalização nos permite obter a solução da equação de Schrödinger independente do tempo, onde extraímos informações sobre os estados estacionários do sistema. Nossos resultados indicam que a interação não-local induz o surgimento de uma nova sub-banda de estados ligados, bem como o alargamento da banda de estados ligados oriunda da interação tipo *on-site*. Tais resultados são corroborados através de uma abordagem analítica do modelo. Através da equação de Schrödinger dependente do tempo acompanhamos a dinâmica das partículas. Os aspectos dinâmicos mostram que a interação *on-site* é responsável por uma dinâmica correlacionada em que os elétrons ocupam predominantemente o mesmo sítio, enquanto que a interação não-local induz um movimento coerente enquanto os elétrons ocupam predominantemente sítios vizinhos. Estas características foram empregadas na investigação do fenômeno do dobramento de frequências das oscilações de Bloch, observado para elétrons interagentes. Neste caso, observamos que a interação não-local também pode ser responsável pelo *hopping* coerente dos elétrons, de forma a apresentarem oscilações de Bloch cuja frequência corresponde ao dobro da frequência de Bloch (prevista para elétrons não interagentes). Entretanto, em algumas configurações, fenômenos competitivos entre estados ligados tipo *on-site*, de primeiros vizinhos e estados não ligados, podem induzir ruídos no espectro de frequência das oscilações.

Palavras-chave: 1. Elétrons correlacionados. 2. Elétron-elétron. 3. Estados ligados. 4. Transporte eletrônico. 5. Interação de primeiros vizinhos.

ABSTRACT

In this Doctoral Thesis we present studies related to the influence of local and nearest-neighbours interactions on the dynamics of two itinerant electrons in one-dimensional lattices. More specifically, we consider the case in which the interaction between the electrons is not restricted to the double occupancy of the electrons in a given site, but also when they are in neighboring sites. Our model is described by means of a tight-binding approach, so that the interaction between the particles arises from a screening effect. Thus, we always consider the nearest-neighbours interaction smaller than the on-site interaction. Our study is based on numerical and analytical studies of the model. The use of numerical techniques of diagonalization allowed us to obtain the solution of the time-independent Schrödinger equation, from that we obtain information about the system eigenstates. Our results indicate that the nonlocal interaction induces the emergence of a new sub band of bound states, as well as the broadening of the band of bound states originating from the on-site interaction. These results are corroborated through an analytical approach of the model. By using the time-dependent Schrödinger equation we follow the dynamics of the particles. Dynamic aspects show that on-site interaction is responsible for correlated dynamics in which electrons occupy predominantly the same site, whereas non-local interaction induces a coherent motion in which electrons occupy predominantly neighboring sites. These characteristics were used in the investigation of the frequency doubling phenomenon of the Bloch oscillations observed for interacting electrons. In this case, we observed that the nonlocal interaction can also be responsible for coherent hopping of the electrons, in order to display Bloch oscillations whose frequency corresponds to doubling Bloch frequency (predicted for non-interacting electrons). However, for some configurations, competitive phenomena between on-site, nearest-neighbour and unbound states, can induce noise in the frequency spectrum of the oscillations.

Keywords: 1. Correlated electrons. 2. Electron-electron. 3. Bound states. 4. Electronic transport. 5. Nearest-neighbour interaction.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1: Níveis de energia em um sistema formado por seis átomos idênticos.	13
Figura 1.2: Bandas de energia de condutores, isolantes e semicondutores.....	14
Figura 1.3: Exemplos de redes cristalinas.....	15
Figura 1.4: Exemplos de redes desordenadas.....	18
Figura 1.5: Função de onda localizada e função de onda estendida	19
Figura 1.6: Comportamento qualitativo da função de escala.....	22
Figura 1.7: Esquema representando a Transição de Mott.....	23
Figura 1.8: Extensão espacial média ξ versus interação de Hubbard U	25
Figura 1.9: Centroide de dois elétrons e suas respectivas transformadas de Fourier.....	26
Figura 1.10: Oscilações de Bloch observadas experimentalmente	27
Figura 2.1: Densidade de estados normalizada	36
Figura 2.2: Distância média entre os dois elétrons	37
Figura 2.3: Função de correlação entre os dois elétrons	38
Figura 2.4: Evolução temporal dos pacotes de onda de dois elétrons.....	45
Figura 2.5: Média temporal da probabilidade de dupla ocupação versus U	47
Figura 2.6: Média temporal da probabilidade de ocupação de primeiro vizinho versus U	48
Figura 2.7: Média temporal da probabilidade de ocupação de segundo vizinho versus U	49
Figura 3.1: Dinâmica de um elétron em uma banda	52
Figura 3.2: Centroide do pacote de onda de 1 elétron em uma rede cristalina	54
Figura 3.3: Esquema do arranjo fotônico para observações das oscilações de Bloch	55
Figura 3.4: Centroide de 1 elétron na presença de campo externo	57
Figura 3.5: Espectros de frequência para as oscilações do pacote de onda	58
Figura 3.6: Probabilidade de dupla ocupação.	59
Figura 3.7: Probabilidades de ocupação de primeiros vizinhos.	60
Figura 3.8: Probabilidades de ocupação de segundos vizinhos.	61

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Modelo de Drude	11
1.2	Modelo de Sommerfeld.....	12
1.3	Teoria de Bandas de Energia	13
1.4	Modelo de Bloch.....	15
1.5	Modelo de Anderson.....	17
1.6	Teoria de Escala da Localização de Anderson.....	19
1.7	Transição de Mott	23
1.8	Modelo de Hubbard	24
1.9	Sistemas com Dois Elétrons Interagentes	24
2	DOIS ELÉTRONS INTERAGENTES EM UMA REDE UNIDIMENSIONAL.....	29
2.1	Dois Elétrons Interagentes com Interação Local e Não-Local.....	29
2.2	Análise Numérica: Aspectos Estacionários	35
2.3	Análise Analítica.....	38
2.4	Análise Numérica: Aspectos Dinâmicos.....	44
3	OSCILAÇÕES DE BLOCH EM SISTEMAS DE ELÉTRONS INTERAGENTES: EFEITOS DA INTERAÇÃO LOCAL E NÃO-LOCAL.....	50
3.1	Oscilações de Bloch em Redes Unidimensionais	50
3.2	Modelo	56
3.3	Resultados	56
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	62
	REFERÊNCIAS	64
	ANEXO	69
	Anexo A: Artigo – O papel da interação local e não-local na dinâmica de duas partículas correlacionadas.....	69

1 INTRODUÇÃO

A descoberta do elétron por Thomson [1], em 1897, proporcionou o surgimento de novas ideias a respeito da condução elétrica nos metais. Desde então as propriedades de transporte eletrônico nos metais têm sido de grande relevância para a Física da Matéria Condensada.

Ainda no final do século XIX a Física Quântica não havia se desenvolvido. Dessa forma, Paul K. Drude [2,3] e Arnold J.W. Sommerfeld [4,5] propuseram os primeiros modelos que tentavam explicar o fenômeno de condução, baseados na teoria cinética dos gases. Nesses modelos os elétrons eram tratados como partículas não interagentes entre si, que se moviam livremente no interior dos sólidos, como um gás, colidindo contra os íons maciços [4]. Primeiramente, Drude procurou explicar, entre outras coisas, a condução de eletricidade e calor pelos metais. Para isso, ele aplicou a distribuição de Maxwell-Boltzmann para obter a velocidade média dos elétrons. Posteriormente Sommerfeld realizou o mesmo estudo, contudo, considerando que os elétrons obedecem ao princípio de exclusão Pauli. Dessa forma, ele aplicou a distribuição de Fermi-Dirac para obter a velocidade média e, com isso, a condutividade. Embora os modelos conseguissem explicar alguns fenômenos de condução, como a corrente contínua, a corrente alternada e efeito Hall, além de encontrar bons valores para a condutividade dos metais, esses modelos não conseguiam descrever certos aspectos e comportamentos de materiais isolantes.

Um dos motivos da falha desses modelos é o fato de que eles não consideravam a natureza ondulatória dos elétrons. Logo, por volta de 1929, empregando formulações da recente Mecânica Quântica, Felix Bloch [6] propôs um novo modelo de condução para os metais, onde foi possível obter informações a respeito dos estados eletrônicos em redes puramente cristalinas. De acordo com Bloch, os elétrons se movem pela rede como ondas planas, onde os estados eletrônicos se distribuem regularmente por toda a rede, caracterizando o fenômeno de condução dos metais.

Contudo, alguns materiais, sob certas circunstâncias, apresentavam um comportamento isolante, contrariando a previsão feita pelo modelo de Bloch. Como exemplo podemos citar alguns óxidos de metais de transição, como o óxido de níquel (NiO) que, embora apresente uma banda d parcialmente ocupada, apresentava caráter isolante. Diante da necessidade de descrever outro fator que impedia a mobilidade dos elétrons, os primeiros estudos foram direcionados à existência de interação entre os elétrons [7]. Alguns anos depois, Nevill F. Mott propôs um

modelo que descreve uma transição metal-isolante induzida pela interação Coulombiana entre elétrons da rede [8].

O interesse nas propriedades de transporte na presença de interação entre as partículas mantém-se ativa [9,10,11,12]. Entre as descrições, um modelo baseado em apenas duas partículas interagentes têm sido bastante utilizado [9]. Embora simplificado, tal modelo se mostra capaz de resgatar aspectos físicos relevantes contidos em sistemas de muitas partículas [9,10,11,12]. Tal modelagem foi utilizada no desenvolvimento dos estudos que compõem esta tese, onde buscamos construir para o entendimento de aspectos físicos de sistemas de elétrons interagentes em sistemas de baixa dimensionalidade. Desta forma, organizamos o texto de maneira que ao longo deste capítulo apresentaremos uma fundamentação teórica, apresentando uma revisão teórica sobre as propriedades de transporte eletrônico em sistemas cristalinos. Em seguida, no capítulo 2, apresentaremos nossos estudos sobre a influência da interação não-local entre dois elétrons interagentes em uma rede cristalina unidimensional. Nosso sistema se baseia em um modelo de Hubbard estendido, onde há uma interação local quando os elétrons ocupam o mesmo sítio, de modo que a interação não-local é resultado de um efeito de *screening* não perfeito. No capítulo 3 iremos analisar a dinâmica de dois elétrons em uma rede cristalina sob ação de um campo elétrico externo. No capítulo 4 faremos uma síntese dos resultados, nossas conclusões e perspectivas.

1.1 Modelo de Drude

Após a descoberta do elétron, por volta de 1900, Paul Drude [2,3,4] propôs um modelo para tentar explicar a condução elétrica e térmica dos metais. Para isso, ele descreve os metais como um sólido formado por íons positivos, idênticos e fixos, onde os elétrons são partículas que se comportavam como um gás clássico, que se moviam livremente no interior dos metais. Além disso, nesse modelo, Drude desconsiderou qualquer interação entre os elétrons.

A partir dessas considerações Drude usou teoria cinética dos gases, aplicando a distribuição de Maxwell-Boltzmann, para estabelecer uma relação entre a condutividade dos metais e sua temperatura. Um importante resultado obtido a partir dessa teoria de condução está relacionado à lei empírica de Wiedmann-Franz. Essa lei estabelece que a razão entre a condutividade térmica k e a condutividade elétrica σ , para a maioria dos metais, é linear com a temperatura. Drude encontrou essa relação como sendo:

$$\frac{k}{\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (1.1)$$

Da equação (1.1) foi obtido:

$$\frac{k}{\sigma T} = 1.11 \cdot 10^{-8} [J^2 / (K^2 C^2)] \quad (1.2)$$

O valor encontrado é a metade do valor experimental para alguns metais de acordo com a lei de Wiedmann-Franz.

Embora simples, o modelo de Drude conseguiu apresentar, para a época, uma boa explicação para a condutividade elétrica de corrente contínua e corrente alternada, efeito Hall e condutividade térmica nos metais. Contudo, ele não levou em conta detalhes da estrutura dos materiais e nem o tipo de átomo em sua composição. Dessa forma, o modelo não previa o comportamento isolante de certos materiais, não sendo capaz de explicar, por exemplo, a discrepância entre os valores da capacidade térmica de metais e isolantes.

1.2 Modelo de Sommerfeld

O modelo de Drude, embora concordasse razoavelmente com os resultados da lei empírica de Wiedemann-Franz, não conseguiu prever os valores para o calor específico dos metais. Com o surgimento da teoria quântica, Arnold J. W. Sommerfeld [4,5] propôs um novo modelo de condução para os metais. Ele levou em consideração que os elétrons são partículas que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, utilizando a distribuição de Fermi-Dirac para estabelecer um novo valor para a razão entre a condutividade térmica k e a condutividade elétrica σ :

$$\frac{k}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (1.3)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, e é a carga do elétron e T é a temperatura. Portanto, da equação (1.3) obtemos:

$$\frac{k}{\sigma T} = 2.45 \cdot 10^{-8} [J^2 / (K^2 C^2)] \quad (1.4)$$

Esse resultado obtido é muito mais próximo do valor correto, ao contrário do resultado obtido por Drude (metade do valor correto).

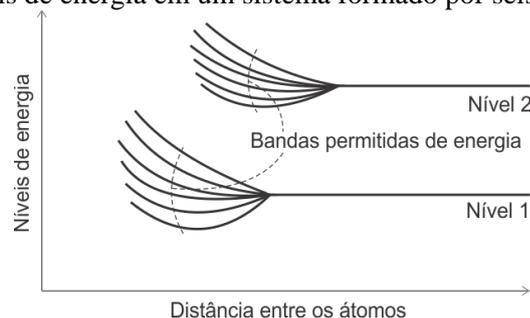
Apesar da melhora significativa na previsão teórica da relação entre a condutividade elétrica e térmica dos metais, o modelo de Sommerfeld ainda deixou alguns questionamentos como “o que determina o número de elétrons de condução?” e “qual a diferença entre metais, semi-metais e isolantes?”. Além disso, esses modelos não foram capazes de explicar o comportamento isolante que certos materiais apresentavam. Um dos principais motivos da falha desses modelos é o fato de que eles não previam a natureza ondulatória dos elétrons.

1.3 Teoria de Bandas de Energia

A partir do final do século XIX, com as formulações da Mecânica Quântica, novas teorias de condução foram desenvolvidas levando em conta a natureza ondulatória dos elétrons, fenômeno até então desconhecido. Essas novas teorias se baseiam no conceito de bandas de energia [5,13,14].

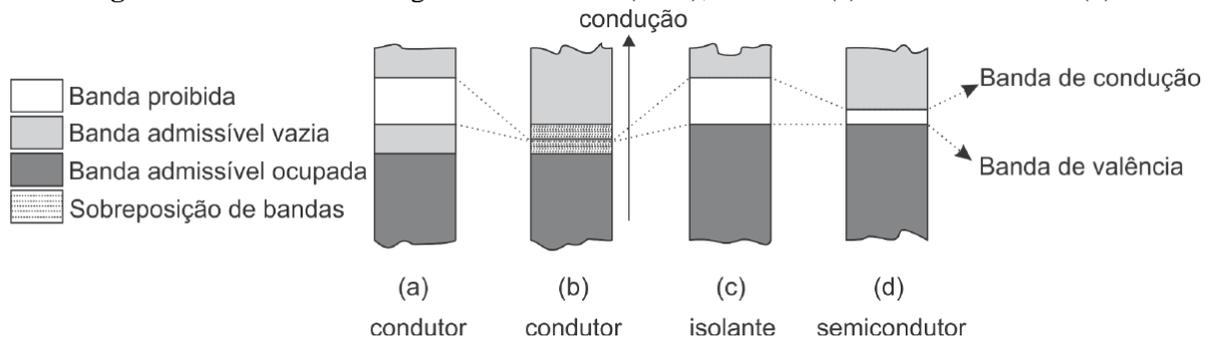
O conceito de bandas de energia leva em conta o modelo atômico quântico, proposto por Niels Bohr em 1912. Segundo Bohr, os elétrons se movem ao redor do núcleo atômico em órbitas “quase” circulares. Cada órbita só permite elétrons com determinados valores de energia mecânica total, denominados níveis de energia. À medida que átomos idênticos ficam mais próximos, começa a ocorrer uma superposição dos orbitais atômicos, fazendo com que os níveis se dividam em faixas de energia mais estreitas, chamadas de subníveis de energia. O conjunto formado por vários subníveis forma uma banda de energia. A figura 1.1 esquematiza o comportamento de dois níveis de energia para um sistema formado por seis átomos idênticos.

Figura 1.1: Níveis de energia em um sistema formado por seis átomos idênticos.



Fonte: Tipler (2006) [13].

Figura 1.2: Bandas de energia de condutores (a e b), isolantes (c) e semicondutores (d).



Fonte: Tipler (2006) [13].

As bandas de energia mais baixas são ocupadas pelos elétrons ligados ao núcleo atômico. As bandas mais energéticas, que contêm os elétrons que participam da condução, são as *bandas de valência*. A banda de valência pode estar totalmente, ou parcialmente, preenchida com elétrons, dependendo do tipo de material. As bandas onde existem estados não ocupados são chamadas de *bandas de condução*. Além disso, existem valores de energia proibidos aos elétrons, formando lacunas que separam as bandas. Essas lacunas resultam da interação entre as funções de onda eletrônica e os núcleos, sendo chamadas de *bandas proibidas de energia*, ou *energy gaps*.

A estrutura das bandas se apresenta de forma diferente para condutores, semicondutores e isolantes, como mostrado na figura 1.2. Como pode ser visto em 1.2a, a banda de valência do condutor está parcialmente preenchida, de modo que os elétrons são excitados mais facilmente, podendo ocupar estados imediatamente superiores. Já no condutor mostrado em 1.2b as bandas admissíveis estão sobrepostas. Nos isolantes, como em 1.2c, a banda de valência está completamente cheia em $T = 0K$. Além disso, existe uma lacuna muito grande separando a banda de valência e a banda de condução. Dessa forma, quando um campo elétrico de intensidade mediana é estabelecido no sólido os elétrons não podem ser acelerados, uma vez que não existem estados desocupados nos níveis de energia vizinhos. Contudo, aplicando sobre o isolante um campo suficientemente forte os elétrons são excitados até terem energia maior que a banda proibida, fazendo com que eles cheguem ao próximo estado disponível (na banda de condução), ocorrendo a ruptura dielétrica. Nos semicondutores, mostrado em 1.2d, a banda proibida é estreita, sendo possível excitar elétrons fazendo-os saltarem para a banda de condução.

Com uma análise mais detalhada do modelo do elétron livre sob a ação de barreiras de potencial é possível compreender melhor a diferença entre condutores e isolantes. Além disso,

a estrutura dos sólidos também contribui com essa diferença. Com base nisso, novos modelos foram desenvolvidos levando em conta essas características, como veremos a seguir.

1.4 Modelo de Bloch

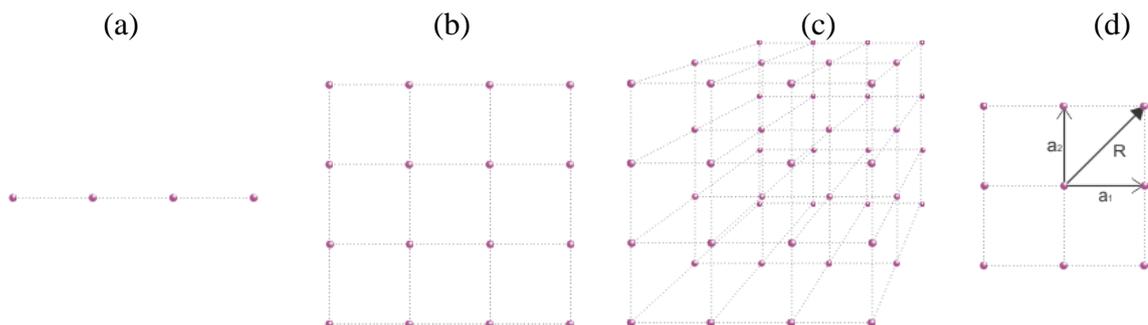
Os primeiros indícios sobre a regularidade geométrica dos cristais surgiram ainda no século XVIII. Contudo, este fato só veio a ser confirmado experimentalmente no início do século XX, através dos experimentos de difração de raios-X e de uma teoria elementar de difração de ondas por um sistema periódico [5]. Diante desta proposta, F. Bloch [6] assumiu que em um sólido puramente cristalino os elementos da base (íons ou átomos) são todos idênticos e estão regularmente distribuídos, como mostrado nas figuras 1.3a, 1.3b e 1.3c. A posição de cada elemento é chamada de sítio e, em uma rede tridimensional por exemplo, pode ser representada por:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (1.5)$$

onde n_i são números inteiros e \vec{a}_i são vetores primitivos da rede, sendo equivalente ao espaçamento entre dois sítios em uma determinada direção. A figura 1.3d mostra o vetor \vec{R} em uma rede bidimensional. Uma repetição “infinita” desse padrão é chamada de *rede de Bravais* [14].

Como os íons são todos iguais, tendo em mente um elétron condutor neste meio, então a energia potencial da interação entre o elétron e o íon em qualquer sítio tem sempre o mesmo valor. Portanto, a energia potencial obedece à expressão de periodicidade:

Figura 1.3: Exemplos de redes cristalinas (a) unidimensional, (b) bidimensional e (c) tridimensional (d) Representação do vetor \vec{R} em uma rede bidimensional.



Fonte: Autor (2018).

$$\mathcal{V}(\vec{r}) = \mathcal{V}(\vec{r} + \vec{R}) \quad (1.6)$$

onde \vec{r} é um vetor qualquer da rede.

Baseado nessa fenomenologia, Bloch desenvolveu um modelo onde é possível obter os estados eletrônicos em redes puramente cristalinas. No modelo de Bloch o Hamiltoniano é descrito por um termo cinético, relativo ao movimento dos elétrons na rede, e um termo de potencial, relacionado à interação elétron-íon nos sítios. Logo, o Hamiltoniano é escrito como:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mathcal{V}(\vec{r}) \quad (1.7)$$

onde $\mathcal{V}(\vec{r})$ obedece à periodicidade apresentada na equação (1.6). Dessa forma, a equação de Schrödinger independente do tempo é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_k(\vec{r}) + \mathcal{V}(\vec{r})\psi_k(\vec{r}) = E\psi_k(\vec{r}) \quad (1.8)$$

onde o índice k está relacionado ao vetor de onda \vec{k} .

Assim, as soluções obtidas para $\psi_k(\vec{r})$ e $\psi_k(\vec{r} + \vec{R})$ obedecem a seguinte relação:

$$|\psi_k(\vec{r} + \vec{R})|^2 = |\psi_k(\vec{r})|^2 \quad (1.9)$$

Conseqüentemente, $\psi_k(\vec{r})$ e $\psi_k(\vec{r} + \vec{R})$ têm o mesmo autovalor de energia E , diferentes entre si apenas por um fator de fase λ . Dessa forma, para uma rede formada por N íons, $\psi_k(\vec{r} + N\vec{R}) = \lambda\psi_k(\vec{r})$. Normalizando o fator de fase ($|\lambda|^2 = 1$), obtemos:

$$\begin{aligned} |\lambda|^2 &= 1 \\ \lambda &= \exp\left(\frac{2\pi i n r}{NR}\right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

onde n é um número inteiro entre 0 e $N - 1$. Então, a função de onda é expressa como:

$$\psi_k(\vec{r}) = \exp\left(\frac{2\pi i n r}{NR}\right) u(\vec{r})$$

$$\Psi_{n,k}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_{n,k}(\vec{r}) \quad (1.11)$$

sendo n o índice de banda relacionado a uma das soluções para a equação de Schrödinger. A partir da equação (1.11), Bloch propõe em seu teorema que “as autofunções da equação de onda eletrônica para um potencial periódico são o produto de uma onda plana $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ vezes uma função $u_k(\vec{r})$, que apresenta a mesma periodicidade da rede cristalina” [5,14].

O modelo de Bloch consegue prever com sucesso a ausência de resistência elétrica em materiais puramente cristalinos. Dessa forma, esse modelo vem sendo amplamente utilizado na descrição de fenômenos eletrônicos em cristais. Dentre suas aplicações temos, por exemplo, o estudo de fenômenos ondulatórios em meios periódicos, como cristais fotônicos [15,16] e fônons [17].

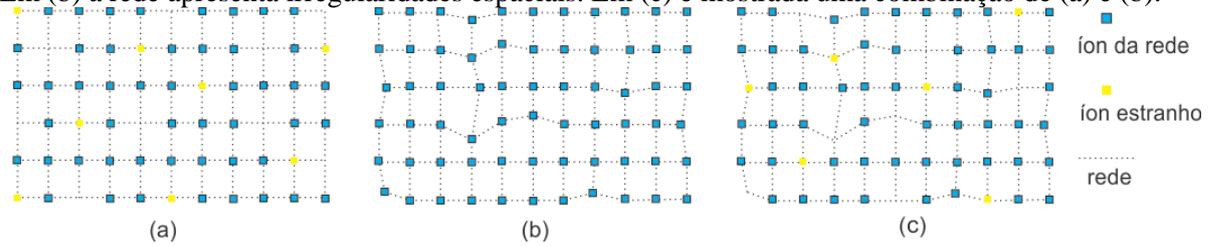
Entretanto, Bloch desconsiderou a interação entre os elétrons da rede. Além disso, ele não previa de que forma a presença de impurezas no sólido poderia influenciar na condução. Assim, o modelo não foi capaz de explicar o comportamento isolante que certos materiais apresentavam. De fato, levando em conta o grande número de elétrons em um sólido, a presença de desordem e a interação entre os elétrons podem influenciar consideravelmente as funções de onda eletrônicas. Isso levou ao desenvolvimento de novos modelos para uma melhor compreensão do fenômeno de condução, como será apresentado a seguir.

1.5 Modelo de Anderson

Até o final da década de 1950 o Modelo de Bloch foi uma importante ferramenta no estudo dos sólidos cristalinos. Porém, esse modelo não contemplava a existência de desordem na estrutura da rede. Tendo em mente esta característica, em 1958 Philip W. Anderson [18] apresentou um modelo que descreve os estados eletrônicos localizados, permitindo o estudo das funções de onda eletrônicas em sistemas desordenados.

Para um melhor entendimento do modelo de Anderson, podemos pensar em como a estrutura dos sólidos desordenados afetam a condução elétrica. Como sabemos, a maioria dos sólidos encontrados na natureza, mesmo os fabricados em laboratórios, não são perfeitamente cristalinos. Suas estruturas apresentam algum tipo de impureza, como elementos distintos da base ou irregularidades espaciais, como mostrado na figura 1.4. Nas estruturas desordenadas as barreiras de potencial estão relacionadas ao tipo de desordem, causando alterações nas reflexões sofridas pela onda eletrônica entre as barreiras. Devido a isso, ocorrem interferências constru-

Figura 1.4: Exemplos de redes desordenadas. Em (a) são encontrados íons estranhos ou espaços vazios. Em (b) a rede apresenta irregularidades espaciais. Em (c) é mostrada uma combinação de (a) e (b).



Fonte: Autor (2018).

tivas e destrutivas, resultando em uma incoerência de fase, formando um padrão específico da função de onda em uma região finita da rede. Esse fenômeno é conhecido como localização da função de onda. Nesse caso, os estados eletrônicos estão localizados e, dessa forma, o sólido apresenta um comportamento isolante.

À medida que a desordem aumenta, a função de onda passa a ser exponencialmente localizada, resultando no padrão mostrado na figura 1.5a. No trabalho de Lee e Ramakrishnan [19] é mostrado que a probabilidade de encontrar o elétron decai exponencialmente com a distância, conforme a expressão (1.12) que mostra o caso unidimensional, onde ξ é o comprimento de localização e x é a posição do elétron:

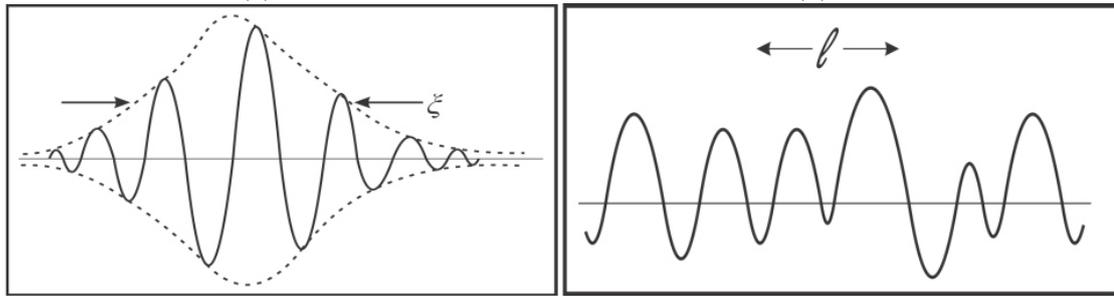
$$\psi(x) \propto \exp\left(-\frac{x}{\xi}\right) \quad (1.12)$$

Baseado nessa fenomenologia, Anderson propôs seu modelo onde ele descreve o Hamiltoniano do sistema em termos da energia cinética do elétron e da energia potencial no sítio. Portanto, no formalismo de segunda quantização, esse Hamiltoniano é expresso como:

$$\mathcal{H} = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (1.13)$$

onde ϵ_i é a energia potencial no sítio i e t_{ij} é a energia cinética de um elétron quando ele salta do sítio i para o sítio j , chamado de *amplitude de hopping*. Os coeficientes c_i^\dagger e c_i são os operadores de criação e de aniquilação, respectivamente, de um elétron no sítio i . Além disso, no modelo de Anderson as energias ϵ_i são distribuídas aleatoriamente pela rede, devido à presença de desordem. Esses valores estão dentro do intervalo $\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$, sendo W conhecido como *largura de desordem*.

Figura 1.5: Representação gráfica de (a) Função de onda localizada e (b) função de onda estendida.



Fonte: P.A. Lee (1985) [19].

Anderson propõe que para um alto grau de desordem as ondas eletrônicas perdem a coerência de fase, resultando na localização da função de onda. Esse fenômeno é conhecido como *localização de Anderson* e o material é conhecido como isolante de Anderson. Contudo, quando um sólido apresenta uma baixa desordem, os potenciais dos íons não interferem substancialmente nas funções de onda eletrônicas. Nesse caso, a função de onda ainda perderia a coerência de fase, mas se manteria estendida por toda a rede, apresentando um padrão semelhante ao mostrado na figura 1.5b. Dessa forma, temos que os estados eletrônicos são estendidos e, com isso, os elétrons podem ser encontrados em qualquer região do sólido.

A partir desse modelo, Anderson abriu portas para novos estudos sobre a condução elétrica dos metais, com o qual foi possível descrever a dinâmica eletrônica em sistemas desordenados. Posteriormente foi verificado que para baixo grau de desordem a função de onda passa a ser estendida. Isso sugere que para um grau de desordem intermediário a função de onda pode passar de estendida para localizada. Esse fenômeno é conhecido como transição metal/isolante induzida por desordem ou *transição de Anderson*.

1.6 Teoria de Escala da Localização de Anderson

A partir da publicação de Anderson, um estudo realizado em 1974 por David J. Thouless [20] propôs um parâmetro capaz de controlar a transição do estado estendido para o estado localizado em $T = 0$. Posteriormente, em 1979, Abrahams e colaboradores [21] descrevem esse parâmetro como sendo uma *condutância generalizada* g , onde é mostrada uma dependência da transição de Anderson com a dimensão da rede. Para isso, Abrahams e colaboradores reformularam o modelo de Anderson, descrevendo um sólido de d dimensões como um arranjo de várias caixas, com volume L^d contendo vários sítios, ao invés de sítios distribuídos na rede. A condutância generalizada é definida como:

$$\frac{1}{g} \approx \frac{\Delta E}{\delta E} \quad (1.14)$$

onde ΔE representa o espaçamento médio entre os níveis e δE é o deslocamento causado por mudanças nas condições de contorno, correspondendo às energias W e t , respectivamente, do modelo de Anderson.

Pelo princípio de incerteza, se estabelece que:

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_D} \quad (1.15)$$

sendo t_D o tempo necessário para um pacote de onda eletrônica difundir até os contornos da caixa de lado L . Se o elétron realiza movimento Browniano dentro da caixa, então:

$$t_D = \frac{L^2}{D} \quad (1.16)$$

onde D é a constante de difusão. A partir da relação de Einstein entre condutividade e propriedades de difusão, temos:

$$\sigma = e^2 D n(E) \quad (1.17)$$

onde σ é a condutividade e $n(E)$ é a densidade média de estados. Logo, combinando a equação (1.17) com as equações (1.15) e (1.16) obtemos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 [L^2 n(E)]} \quad (1.18)$$

Escrevendo a densidade média de estados como função do espaçamento médio entre os níveis, temos:

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E} \quad (1.19)$$

Na teoria de escala, a condutância mede a força da desordem, de forma análoga a W/B no modelo de Anderson (sendo W a largura de desordem e B a largura da banda – se $W > B$ o sólido é fortemente desordenado, se comportando como um isolante; se $W < B$ o sólido é um condutor). Com isso, estados estendidos são sensíveis à mudança na condição de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados localizados não são sensíveis à mesma mudança ($\delta E < \Delta E$). Substituindo as equações (1.18) e (1.19) na equação (1.14), obtemos o comportamento de escala do parâmetro g :

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} \quad (1.20)$$

Considerando g_0 como a condutância generalizada para um sistema composto por caixas acopladas, de volume L_0^d , temos:

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)} \quad (1.21)$$

Assim, podemos obter a condutância para uma escala maior, $L = L_0 b$, onde b é o fator de escala. Se b for tratado como uma transformação contínua, o comportamento de escala de g pode ser determinado por uma função β :

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \quad (1.22)$$

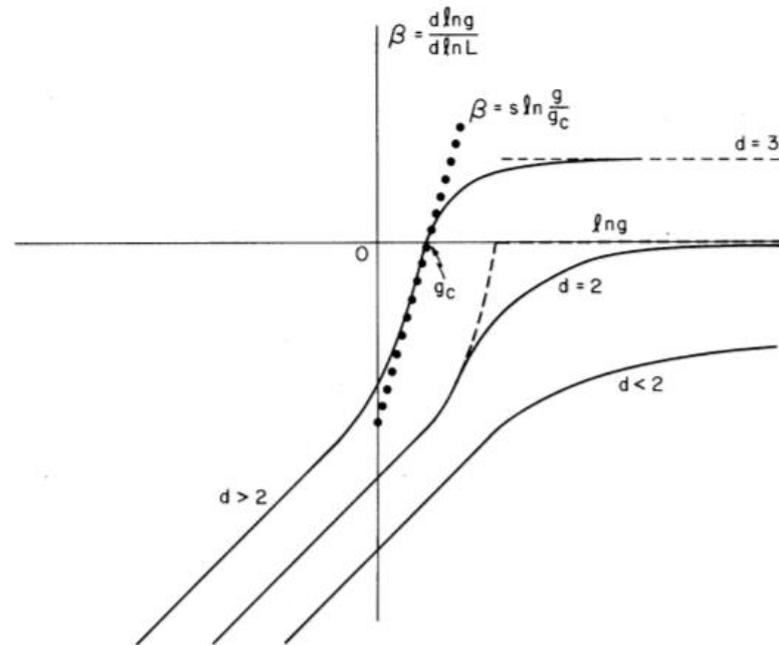
A figura 1.6 mostra o comportamento da função de escala $\beta(g)$ para os casos em que $d = 1, 2$ e 3.

O comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ é obtido a partir do comportamento assintótico de g , tomando os limites $g \rightarrow 0$ e $g \rightarrow \infty$. Dessa forma, das equações (1.20) e (1.22), temos:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2 \quad (1.23)$$

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g \quad (1.24)$$

Figura 1.6: Comportamento qualitativo da função de escala $\beta(g)$ para $d=1, 2$ e 3 na teoria de escala.



Fonte: Abrahams *et al* (1979) [21].

Portanto, com base no comportamento de $\beta(g)$ (ver equação (1.22)) mostrado na figura 1.6, podemos concluir que:

- $\beta > 0$: g cresce com o aumento de L , caracterizando um comportamento metálico.
- $\beta \leq 0$: g diminui com o aumento de L , caracterizando um comportamento isolante. Podemos observar que para g muito pequeno, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$. Segundo a teoria de Anderson, isso demonstra que há um fraco acoplamento entre as caixas e uma desordem forte, de modo que os estados eletrônicos são localizados e decaem exponencialmente com a distância.

Além disso, existe um ponto crítico no diagrama de fluxo, g_c , chamado de *ponto fixo instável*, quando $\beta = 0$. Observando a figura 1.6, vemos que há uma dependência da transição de Anderson com a dimensão: apenas para $d = 3$ existe a transição metal-isolante, tendo um comportamento metálico, se $g > g_c$, ou isolante, se $g < g_c$. Nos casos unidimensional e bidimensional (respectivamente $d = 1$ e $d = 2$) apenas apresentam comportamento isolante.

1.7 Transição de Mott

Apesar do modelo de Bloch descrever a condução elétrica em sólidos puramente cristalinos, ele não conseguia explicar o comportamento isolante de certos materiais. Além disso, embora o modelo proposto por Anderson consiga prever o comportamento isolante para sólidos desordenados, ele desconsidera a interação entre os elétrons da rede, não sendo capaz de explicar a condução elétrica em certos tipos de materiais tipicamente isolantes, como o óxido de níquel (NiO) e o óxido de cobre (Cu_2O) por exemplo. Com base nisso, Nevill F. Mott publicou uma série de trabalhos [7,8,22] que apresenta uma nova teoria, onde a transição metal/isolante é induzida por uma interação Coulombiana entre os elétrons.

Para analisar esse tipo de transição, vamos considerar uma rede de N átomos contendo um elétron para cada orbital atômico. No caso cristalino estes N elétrons irão originar uma banda de estados de largura B , conhecida como *banda de Bloch* (que vai de $-B/2$ a $B/2$). Logo, segundo a teoria de Bloch, na fase metálica a energia média de um elétron de valência será $-B/4$. Além disso, como o sistema é metálico, os elétrons têm grande mobilidade eletrônica e podem ocupar qualquer orbital da rede, possibilitando a ocorrência de dupla ocupação. Existindo dois elétrons de *spins* opostos no mesmo orbital, observa-se uma repulsão Coulombiana U entre eles. Assim, se o custo energético desta dupla ocupação for grande o suficiente para inibir a propagação do elétron ($U > B$), o sistema apresenta um comportamento isolante; caso contrário, o *hopping* entre os sítios continua a acontecer, resultando em um comportamento metálico. Devido a esse fenômeno, na fase isolante os sólidos recebem o nome de *isolantes de Mott*, sendo neste caso, uma transição metal-isolante induzida pela interação, também conhecida como *transição de Mott*. A figura 1.7 ilustra a transição de Mott, onde um material passa de um regime metálico (superfluido) para um regime isolante.



Fonte: BULUTA, L. e NORI, F. (2009) [23].

1.8 Modelo de Hubbard

Na seção anterior foi mostrado que em sistemas com elétrons interagentes ocorre uma competição entre um termo cinético, referente à movimentação dos elétrons, e um termo potencial, referente à interação entre os elétrons. Com base nesses conceitos, John Hubbard [24] propôs um modelo que contempla a interação entre os elétrons para descrever a dinâmica eletrônica em metais de transição ferromagnéticos. Nesse modelo, o Hamiltoniano é constituído por um termo de energia cinética t e um termo de interação Coulombiana, com energia potencial U , mostrado na equação 1.25:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,j} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1.25)$$

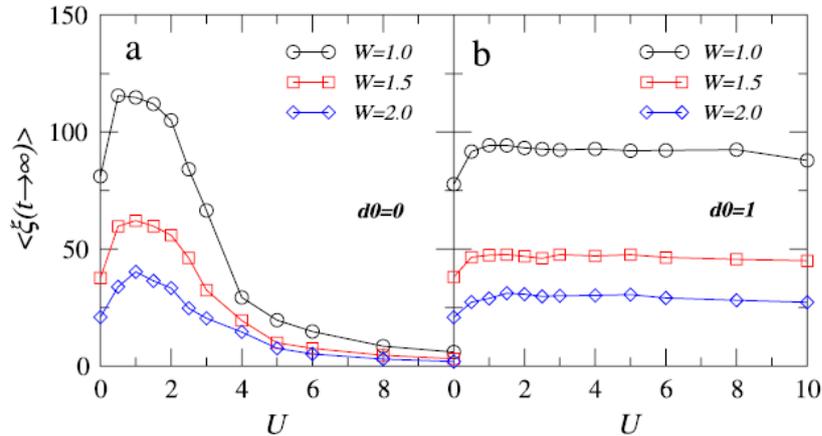
onde $c_{i\uparrow}^\dagger$ e $c_{j\downarrow}$ são, respectivamente, o operador de criação de um elétron com *spin up* no sítio i e o operador de aniquilação de um elétron com *spin down* no sítio j . Neste modelo, a largura da banda de estados é $W = 2zt$, onde z é o número de primeiros vizinhos. Logo, o comportamento do sistema pode ser determinado pela razão W/U : para $W \gg U$ os elétrons são independentes e o sistema apresenta um comportamento metálico; para $W \ll U$, a correlação eletrônica se torna forte e o sistema terá comportamento isolante. Dessa forma, o modelo de Hubbard mostra-se capaz de recuperar aspectos apresentados pela transição de Mott. Em função da simplicidade matemática e vasto número de propriedades subjacentes aos parâmetros básicos contidos no modelo, o modelo de Hubbard tem se mostrado como referência para vários outros sistemas físicos [25,26].

Sistemas de partículas interagentes seguem despertando grande interesse na comunidade acadêmica, sendo objeto de estudos tanto no âmbito teórico como no experimental, onde citamos estudos sobre propriedades magnéticas em isolantes de Mott [27] e supercondutividade em altas temperaturas [28], bem como a verificação experimental da existência da transição de Mott em redes ópticas [23] e arranjos fotônicos [29].

1.9 Sistemas com Dois Elétrons Interagentes

De maneira geral, abordagens teóricas que incorporam a interação entre elétrons em sistemas de muitos corpos apresentam peculiaridades. Mesmo o modelo de Hubbard, um dos

Figura 1.8: Extensão espacial média ξ versus interação de Hubbard U .



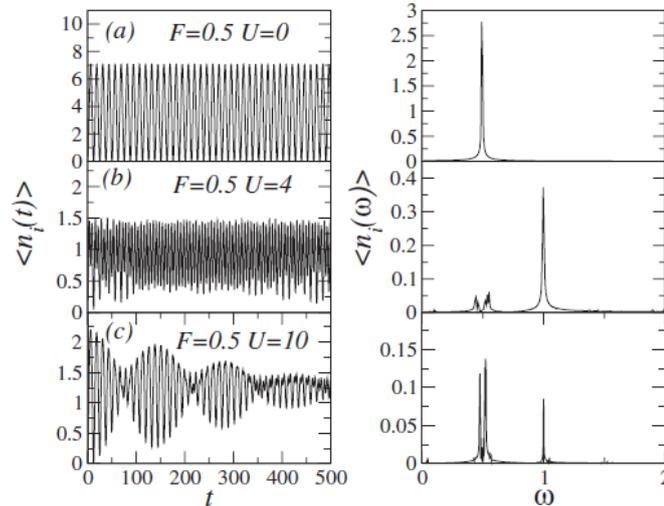
Fonte: DIAS, W.S. e LYRA, M.L. (2014) [30].

modelos mais simples a considerar partículas interagentes em uma rede cristalina, apresenta algumas dificuldades na obtenção da sua solução. Algumas dessas dificuldades estão relacionadas ao caráter perturbativo do problema, onde o termo de interação não seria pequeno o suficiente para ser um parâmetro na expansão perturbativa. Outras estão relacionadas ao esforço computacional, uma vez que o número de estados possíveis do sistema cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Soluções envolvendo método perturbativo para sistemas de muitos corpos na presença de interação elétron-elétron são conhecidas para sistemas unidimensionais [31,32,33,34].

Dentro deste contexto destacamos um modelo mais simples e que tem mostrado bons resultados, proposto por Dima L. Shepelyansky [9]. Neste modelo é considerada a existência de apenas duas partículas itinerantes em uma rede 1D, cuja interação entre elas é do tipo *on-site*, como descrita no modelo de Hubbard apresentado na seção anterior. Motivado pelo comportamento observado experimentalmente em anéis mesoscópicos [11,12], seu modelo conta com os potenciais distribuídos desordenadamente. Em seus estudos, Shepelyansky mostrou que se a distância entre as partículas for maior que o comprimento de localização de uma única partícula, a influência da interação será pequena. Mas, caso a distância entre as partículas seja próxima do comprimento de localização de uma única partícula, as duas partículas poderão se mover coerentemente. Neste último caso, as partículas apresentam uma localização de Anderson (induzida pela desordem) menor que a localização observada para sistemas sem interação. Assim, embora seja um modelo simples, ele resgata aspectos fenomenológicos de muitas partículas [11,12].

Resultados mais recentes mostram a formação de estados ligados devido a existência da interação local, promovendo o movimento coerente dessas partículas como se fossem uma úni-

Figura 1.9: Centroide de dois elétrons inicialmente no mesmo sítio (à esquerda) e suas respectivas transformadas de Fourier (à direita).

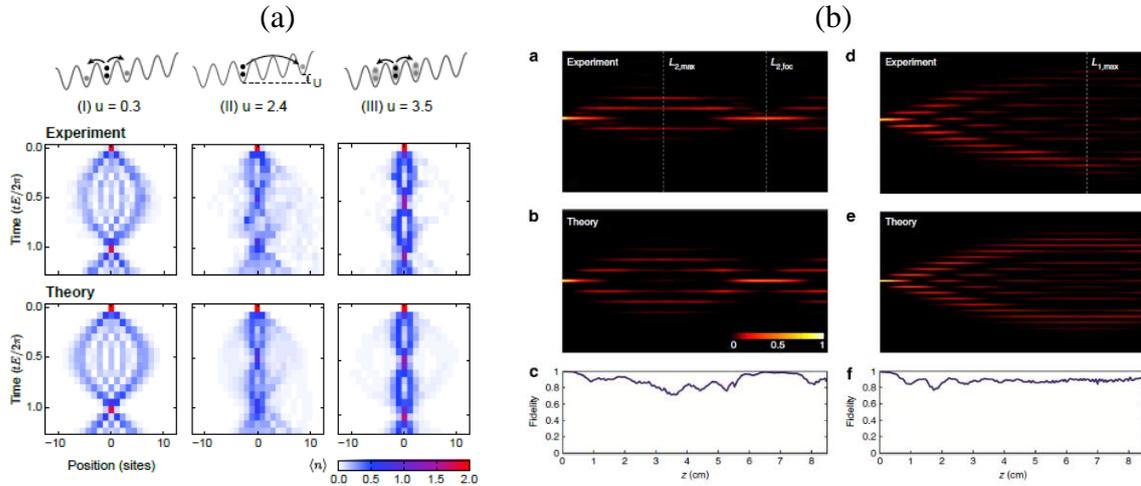


Fonte: DIAS, W.S., *et al* (2007) [35].

ca partícula [30]. Assim, o fenômeno do enfraquecimento da localização de Anderson é descrito por um comportamento não monotônico da localização com relação à interação entre partículas, tendo origem na competição entre os estados ligados e não-ligados das duas partículas. Este comportamento pode ser observado na figura 1.8, onde é mostrado a extensão espacial média após um tempo muito longo versus interação em redes com diferentes larguras de desordem. A extensão espacial média após um tempo muito longo nos dá uma ideia do quanto a função de onda eletrônica se estende pela rede. Na figura 1.8a os elétrons estão alocados inicialmente no mesmo sítio, enquanto que na figura 1.8b os elétrons estão alocados inicialmente em sítios vizinhos. Quando as partículas ocupam inicialmente o mesmo sítio, o acoplamento causa um enfraquecimento da localização. Para as partículas inicialmente afastadas, observamos que não há um enfraquecimento significativo. Este comportamento não monotônico é corroborado por resultados envolvendo sistemas de muitas partículas, como nas referências [36,37,38].

Outro fenômeno induzido pela interação entre elétrons é o dobramento da frequência das oscilações de Bloch. Em um estudo realizado em 2007, Dias e colaboradores [35] descreveram o papel de uma interação local, tipo Hubbard, na dinâmica de dois elétrons em uma rede 1D cristalina, sujeita a um campo elétrico externo. Foi mostrado que para um valor de interação ($U = 4$) os elétrons apresentam um movimento correlacionado, resultando no dobramento da frequência de oscilação, como mostrado na figura 1.9. Desta forma, os estados ligados que surgem em função da interação entre as partículas desempenham um papel relevante sobre os auto-estados do sistema.

Figura 1.10: Oscilações de Bloch observadas experimentalmente em redes ópticas (a) e arranjos fotônicos (b).



Fontes: (a) PREISS, P.M., *et al* (2015) [39]; (b) CORRIELLI, G., *et al* (2013) [40].

Este tratamento teórico despertou também interesse experimental, onde a observação experimental foi reportada em redes ópticas contendo átomos ultrafrios [39] e também em um arranjo fotônico equivalente [40]. No primeiro caso, átomos de ^{87}Rb ultra resfriados foram dispostos em uma rede óptica periódica, onde parâmetros como amplitude de *hopping* e interação entre as partículas são controlados através de ajustes na rede óptica (ver figura 1.10a). Através de um arranjo previsto teoricamente por Longhi [41], onde um análogo fotônico é proposto para a descrição do modelo de duas partículas interagentes, o fenômeno do dobramento das frequências das oscilações de Bloch também foi observado experimentalmente [40] (ver figura 1.10b).

Nos modelos supracitados a interação entre as partículas se dá somente quando elas ocupam o mesmo sítio. Entretanto, é razoável pensar que as partículas possam continuar a interagir enquanto ainda estão próximas, e não necessariamente no mesmo sítio. Neste caso a interação pode ser pensada através de um efeito do *screening* eletrostático, passando a ser menor à medida que as partículas estão mais afastadas. Para sistemas de muitas partículas interagentes esta abordagem é apresentada na literatura através do modelo de Hubbard estendido [42,43,44]. Sob esta descrição, tem sido reportado que as interações não-locais geralmente diminuem as correlações em sistemas *half-filled* [42,44], sugerindo que estas interações não-locais são parâmetros relevantes na descrição da dinâmica eletrônica.

Dentro deste cenário, apresentamos como tema central desta tese de doutorado investigações sobre modelos que tratam de duas partículas interagentes em um sistema cristalino em uma rede linear, onde a interação acontece não somente quando elas estão no

mesmo sítio, mas também quando ocupam sítios vizinhos. Num primeiro momento estudamos o caso de duas partículas dispostas em uma rede cristalina unidimensional, sem influência de qualquer agente externo. Como veremos no capítulo 2, através de uma descrição analítica e método numérico de diagonalização, apresentamos que a interação não-local é responsável pelo aparecimento de uma nova sub-banda de estados ligados. Através da resolução da equação de Schrödinger dependente do tempo, investigamos a evolução temporal de um pacote de onda de dois elétrons. Esta análise mostra que, enquanto a interação *on-site* é responsável por induzir uma dinâmica correlacionada em que os elétrons ocupam predominantemente o mesmo sítio, a interação de primeiros vizinhos mostra-se capaz de induzir um movimento coerente onde os elétrons são mantidos predominantemente em sítios vizinhos. No capítulo 3, abordaremos o papel dessas interações em sistemas onde um campo elétrico externo atua paralelamente à rede. A evolução temporal do pacote de onda nos revela que, na ausência de interação, o pacote oscila em torno de sua posição inicial, desenvolvendo oscilações de Bloch. Na presença de interação local o movimento coerente dos dois elétrons é responsável pelo dobramento da frequência de oscilação. Com o surgimento de uma nova sub-banda de estados ligados devido à interação não-local, as oscilações permanecem coerentes mesmo quando os elétrons ocupam sítios vizinhos, resultando na manutenção do dobramento da frequência de oscilação.

2 DOIS ELÉTRONS INTERAGENTES EM UMA REDE UNIDIMENSIONAL

Os estudos que serão apresentados neste capítulo foram direcionados a dois elétrons interagentes em redes cristalinas. Consideramos que os dois elétrons possuem *spins* opostos, com a interação entre eles do tipo Hubbard estendido, com um custo energético para a dupla ocupação no mesmo sítio atômico, bem como também quando estiverem em sítios vizinhos. Além dos estados eletrônicos, avaliamos também o comportamento dinâmico dos pacotes de onda eletrônicos. Através da diagonalização direta do Hamiltoniano e também tratamento analítico, nossos resultados indicam um alargamento da sub-banda de estados associada usualmente à interação local, bem como o surgimento de uma nova sub-banda de estados ligados em função da existência da interação de primeiros vizinhos. Ao acompanharmos a evolução temporal dos elétrons, observamos que esta nova banda de estados ligados exerce um papel relevante sobre a dinâmica dos mesmos. Enquanto a banda de estados ligados relacionada à interação *on-site* é capaz de induzir uma caminhada quântica dos elétrons ocupando predominantemente os mesmos sítios, a nova banda de estados ligados induz uma dinâmica em que os elétrons são mantidos em sítios vizinhos. O trabalho aqui apresentado foi publicado em 2016 na revista *Solid State Communications* [45].

2.1 Dois Elétrons Interagentes com Interação Local e Não-Local

O modelo de Hubbard tem se mostrado relevante no estudo de sistemas envolvendo muitas partículas interagentes. Além de seu formato tradicional, apresentado na seção 1.8, há também o modelo de Hubbard estendido [35,46,47,48,49,50,51,52]. Em muitos casos, assume-se o efeito de *screening*, onde existe uma blindagem eletrostática ao redor do íon devido a uma nuvem eletrônica. Assim, os elétrons só poderiam interagir entre si caso estivessem no mesmo sítio. Entretanto, devido a um *screening* imperfeito podem ocorrer interações não-locais entre as partículas. Tal consideração tem sido empregada nos estudos de supercondutividade em supercondutores de óxido de cobre [50], entrelaçamento e transição de fase [51] e deformações na superfície de Fermi [52]. Em um estudo pioneiro publicado em 2004, Gu e colaboradores [51] mostraram que o entrelaçamento entre elétrons pode ser usado na identificação de transição de fases em sistemas fermiônicos. Os autores consideraram em seu modelo uma interação local e de primeiros vizinhos entre os elétrons, descrevendo o entrelaçamento como função dessas interações. Em outro estudo, realizado por Valenzuela e Vozmediano [52], foi mostrado que a

presença de uma interação Coulombiana não-local é responsável por mudanças na topologia da superfície de Fermi.

Tendo em mente a fenomenologia supracitada, de modo a descrever o movimento de dois elétrons interagentes, de *spins* opostos, em uma rede cristalina unidimensional, escrevemos nosso Hamiltoniano, no formalismo de segunda quantização, como:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle lm \rangle} \sum_{\sigma} c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} + U \sum_l \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{l,2} + V \sum_{\langle lm \rangle} \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{m,2} + \sum_l \sum_{\sigma} \epsilon_l \hat{n}_{l,\sigma} \quad (2.1)$$

onde $c_{l,\sigma}^{\dagger}$ e $c_{l,\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação para uma partícula com *spin* $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ e sítio l , com $\hat{n}_{l,\sigma} = c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma}$, $\langle lm \rangle$ denota primeiros vizinhos, J é o termo cinético, U é a interação local, V é a interação de primeiros vizinhos e ϵ_l é a energia de interação elétron/íon no sítio l . Além disso, considerando que não haja acoplamento entre *spin* e posição, e que os elétrons são distinguíveis por *spin*, podemos escrever os estados de posição, na representação de Wannier, como:

$$|\Phi\rangle = \sum_{l,m} f_{l,m} |l, \sigma; m, \sigma'\rangle \quad (2.2)$$

sendo $|l, \sigma; m, \sigma'\rangle$ o estado de um elétron com *spin* σ , no sítio l , e o outro elétron com *spin* σ' , no sítio m ; $f_{l,m}$ é a amplitude de probabilidade. Impondo algumas condições nas posições dos elétrons (l e m), podemos encontrar uma relação de recorrência para, a partir dela, fazer uma descrição do Hamiltoniano na forma matricial. Assim, resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo $\mathcal{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$, podemos obter os auto-estados e utilizá-los na caracterização do sistema. Dessa forma, aplicando o Hamiltoniano (2.1) obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}|\Phi\rangle = & \underbrace{J \sum_{\langle lm \rangle} \sum_{\sigma} c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} |\Phi\rangle}_{H_1} + \underbrace{U \sum_l \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{l,2} |\Phi\rangle}_{H_2} + \underbrace{V \sum_{\langle lm \rangle} \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{l,2} |\Phi\rangle}_{H_3} \\ & + \underbrace{\sum_l \sum_{\sigma} \epsilon_l \hat{n}_{l,\sigma} |\Phi\rangle}_{H_4} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para um melhor entendimento da resolução do modelo, analisamos cada termo separadamente. Portanto, para $m = l$:

- Em H_1 temos:

$$H_1|\Phi\rangle = J \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} (|l + 1_\uparrow, l_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle + |l - 1_\uparrow, l_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l - 1_\downarrow\rangle) \quad (2.4)$$

- Em H_2 :

$$H_2|\Phi\rangle = U \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} |l_\uparrow, l_\downarrow\rangle \quad (2.5)$$

- Como H_3 possui um termo de interação de primeiros vizinhos, neste caso ele será nulo já que os elétrons ocupam o mesmo sítio ($l = m$).

- Em H_4 :

$$H_4|\Phi\rangle = \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} 2\epsilon_l |l_\uparrow, l_\downarrow\rangle \quad (2.6)$$

Combinando as equações (2.4), (2.5) e (2.6) obtemos:

$$E|\Phi\rangle = \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} [J(|l + 1_\uparrow, l_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle + |l - 1_\uparrow, l_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l - 1_\downarrow\rangle) + (U + 2\epsilon_l)|l_\uparrow, l_\downarrow\rangle] \quad (2.7)$$

Para $m = l + 1$:

- Em H_1 :

$$H_1|\Phi\rangle = J \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} (|l + 1_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l + 2_\downarrow\rangle + |l - 1_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l_\downarrow\rangle) \quad (2.8)$$

- Como H_2 é um termo de interação de Hubbard, ele só existe caso os elétrons ocupem o mesmo sítio. Dessa forma, para $l \neq m$, H_2 será nulo.

- Em H_3 :

$$H_3|\Phi\rangle = V \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} |l_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle \quad (2.9)$$

- Em H_4 :

$$H_4|\Phi\rangle = \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_l + \epsilon_{l+1}) |l_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle \quad (2.10)$$

Combinando as equações (2.8), (2.9) e (2.10) obtemos:

$$\begin{aligned} E|\Phi\rangle = \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} [& (|l + 1_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l + 2_\downarrow\rangle + |l - 1_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l_\downarrow\rangle) \\ & + (V + \epsilon_l + \epsilon_{l+1}) |l_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle] \end{aligned} \quad (2.11)$$

Para $m = l + 2$:

- Em H_1 :

$$\begin{aligned} H_1|\Phi\rangle = J \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} (& |l + 1_\uparrow, l + 2_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l + 3_\downarrow\rangle + |l - 1_\uparrow, l + 2_\downarrow\rangle \\ & + |l_\uparrow, l + 1_\downarrow\rangle) \end{aligned} \quad (2.12)$$

- Da mesma forma que no caso anterior H_2 também será nulo.
- Para $l \neq m - 1$ H_3 também será nulo, já que ele é um termo de interação de primeiros vizinhos.
- Em H_4 :

$$H_4|\Phi\rangle = \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_l + \epsilon_{l+2}) |l_\uparrow, l + 2_\downarrow\rangle \quad (2.13)$$

Combinando as equações (2.12) e (2.13) obtemos:

$$E|\Phi\rangle = \sum_{l_\uparrow, m_\downarrow} f_{l_\uparrow, m_\downarrow} [J(|l+1_\uparrow, l+2_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l+3_\downarrow\rangle + |l-1_\uparrow, l+2_\downarrow\rangle + |l_\uparrow, l+1_\downarrow\rangle) + (\epsilon_l + \epsilon_{l+2})|l_\uparrow, l+2_\downarrow\rangle] \quad (2.14)$$

Logo, aplicando $\langle\Phi|$ nas equações (2.7), (2.11) e (2.14), e considerando apenas os termos não-nulos, encontramos as equações:

- Para $m = l$:

$$E f_{l,l} = J(f_{l+1,l} + f_{l,l+1} + f_{l-1,l} + f_{l,l-1}) + (2\epsilon_l + U)f_{l,l} \quad (2.15)$$

- Para $m = l + 1$:

$$E f_{l,l+1} = J(f_{l+1,l+1} + f_{l,l+2} + f_{l-1,l+1} + f_{l,l}) + (\epsilon_l + \epsilon_{l+1} + V)f_{l,l+1} \quad (2.16)$$

- Para $m = l + 2$:

$$E f_{l,l+2} = J(f_{l+1,l+2} + f_{l,l+3} + f_{l-1,l+2} + f_{l,l+1}) + (\epsilon_l + \epsilon_{l+2})f_{l,l+2} \quad (2.17)$$

Comparando as equações (2.15), (2.16) e (2.17), finalmente obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$E f_{l,m} = J(f_{l+1,m} + f_{l,m+1} + f_{l-1,m} + f_{l,m-1}) + [\epsilon_l + \epsilon_m + U\delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})]f_{l,m} \quad (2.18)$$

Na forma matricial o Hamiltoniano é construído a partir de um espaço de Hilbert expandido, da ordem de N^2 , sendo N o tamanho da rede. Portanto, considerando uma rede unidimensional de 3 sítios, por exemplo, a matriz é escrita como:

$$H = \begin{array}{c|cccccccccc} N=3 & |1,1\rangle & |1,2\rangle & |1,3\rangle & |2,1\rangle & |2,2\rangle & |2,3\rangle & |3,1\rangle & |3,2\rangle & |3,3\rangle \\ \hline \langle 1,1| & 2\epsilon_1 + U & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1,2| & J & \epsilon_1 + \epsilon_2 + V & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1,3| & 0 & J & \epsilon_1 + \epsilon_3 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\ \langle 2,1| & J & 0 & 0 & \epsilon_2 + \epsilon_1 & J & 0 & J & 0 & 0 \\ \langle 2,2| & 0 & J & 0 & J & 2\epsilon_2 + U & J & 0 & J & 0 \\ \langle 2,3| & 0 & 0 & J & 0 & J & \epsilon_2 + \epsilon_3 & 0 & 0 & J \\ \langle 3,1| & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 & J & 0 \\ \langle 3,2| & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & \epsilon_3 + \epsilon_2 + V & J \\ \langle 3,3| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & J & 2\epsilon_3 + U \end{array} \quad (2.19)$$

Redes bidimensionais ou tridimensionais apresentam matrizes um pouco diferentes. Para obter informações dos auto-estados do sistema, a matriz é diagonalizada através da equação secular:

$$\det(\mathcal{H} - \lambda I) = 0 \quad (2.20)$$

Isso também pode ser feito computacionalmente utilizando rotinas numéricas apropriadas, como a biblioteca LAPACK [53] de rotinas de álgebra linear, utilizadas em nosso estudo.

Para analisar os aspectos dinâmicos resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\mathcal{H}|\Phi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle \quad (2.21)$$

De forma similar ao caso estacionário, aplicamos o Hamiltoniano (2.1) à equação (2.21), obtendo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}|\Phi(t)\rangle = & J \underbrace{\sum_{\langle lm \rangle} \sum_{\sigma} c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} |\Phi(t)\rangle}_{H_5} + U \underbrace{\sum_l \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{l,2} |\Phi(t)\rangle}_{H_6} \\ & + V \underbrace{\sum_{\langle lm \rangle} \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{m,2} |\Phi(t)\rangle}_{H_7} + \underbrace{\sum_l \sum_{\sigma} \epsilon_l \hat{n}_{l,\sigma} |\Phi(t)\rangle}_{H_8} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Impondo as mesmas condições nas posições l e m dos dois elétrons, como no caso estacionário, e tomando $\hbar \approx 1$ obtemos a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} f_{l,m}(t) = & J[f_{l+1,m}(t) + f_{l,m+1}(t) + f_{l-1,m}(t) + f_{l,m-1}(t)] \\ & + [\epsilon_l + \epsilon_m + U\delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})]f_{l,m}(t) \end{aligned} \quad (2.23)$$

A partir da equação (2.23) podemos obter a evolução temporal do pacote de onda. Para isso, um método numérico pode ser implementado, como o método de Runge-Kutta [54] ou a expansão de Taylor do operador de evolução temporal [45,55].

A seguir apresentaremos os resultados das investigações numéricas, oriundas das equações de Schrödinger independente e dependente do tempo, bem como análise analítica do Hamiltoniano.

2.2 Análise Numérica: Aspectos Estacionários

Para analisar os aspectos estacionários, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$E f_{l,m} = f_{l+1,m} + f_{l,m+1} + f_{l-1,m} + f_{l,m-1} + [U\delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})]f_{l,m} \quad (2.24)$$

onde tomamos os valores de referência $J = 1$, para energia cinética, e $\epsilon_l = 0$, para o potencial iônico cristalino. Para isso, reescrevemos o Hamiltoniano na forma matricial e obtivemos os autovalores de energia aplicando um método numérico de diagonalização, utilizando as rotinas LAPACK [53].

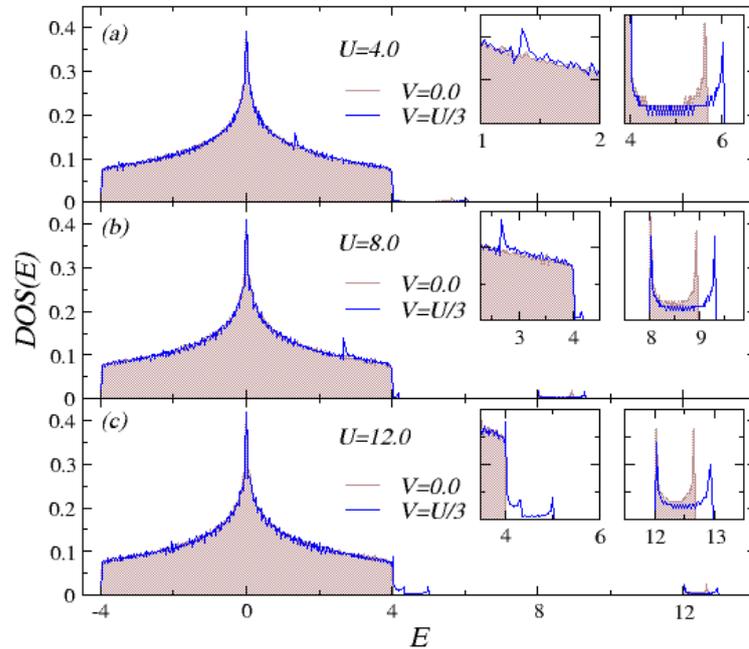
O primeiro aspecto investigado foi a densidade de estados normalizada (DOS – *Density Of States*), definida por:

$$DOS(E) = \frac{1}{N} \sum_l \delta(E - E_l) \quad (2.25)$$

Como o número de estados disponíveis é muito grande ($N^2 \times N^2$), para viabilizar computacionalmente esta análise utilizamos uma rede linear com apenas 200 sítios. A figura 2.1 mostra os resultados da densidade de estados para $U = 4, 8$ e 12 , com $V = 0$ (curva preenchida de marrom) e $V \neq 0$ (curva azul).

Na figura 2.1a podemos ver no detalhe o surgimento de uma sub-banda de estados ligados, para $V = 0$, cuja largura é reportada na literatura [35,46,47] como sendo $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$. Além disso, podemos observar mais claramente nos detalhes que a interação V promove um alargamento dessa sub-banda. A presença da interação não-local entre os elétrons (como $V = U/3$) resultou na emergência de um pico na banda principal nos casos em que $U = 4$ e $U = 8$, sugerindo a formação de uma nova sub-banda. Isso fica mais evidente para $U = 12$ (ver figura 2.1c), onde podemos ver claramente uma nova sub-banda já formada, separada da banda principal.

Figura 2.1: Densidade de estados normalizada para uma rede de 200 sítios, com (a) $U = 4$, (b) $U = 8$ e (c) $U = 12$. Para cada caso, temos ainda $V = 0$ e $V \neq 0$. Os resultados mostram que a presença de interação não-local promove o alargamento da sub-banda de estados ligados, bem como a criação de uma nova sub-banda.



Fonte: PEIXOTO, A.S. e DIAS, W.S. (2016) [45].

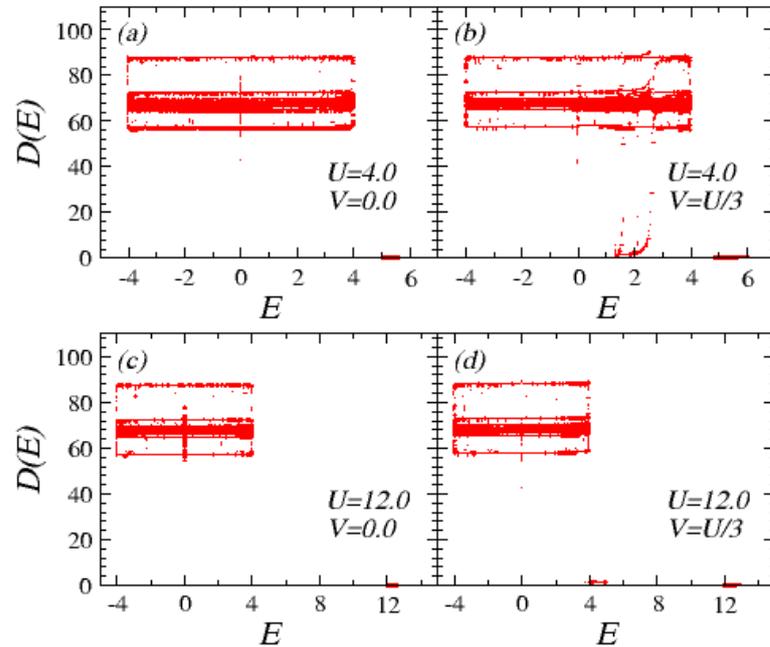
Para compreender melhor a natureza dos auto-estados, também investigamos a distância média, definida pela expressão:

$$D(E) = \sum_{l,m} |l - m| |f_{l,m}|^2 \quad (2.26)$$

A distância média mede a diferença entre os autovalores de energia dos dois elétrons. Valores altos para a distância indicam uma grande separação entre os estados eletrônicos, os caracterizando como estados não-ligados. Nesse caso os elétrons são independentes entre si. Já valores baixos indicam uma correlação entre os estados – para valores nulos, os estados são degenerados, ou seja, os elétrons apresentam os mesmos autovalores de energia. Logo, esse comportamento caracteriza os estados como ligados [35]. A figura 2.2 mostra os gráficos de D versus E para uma rede cristalina com 200 sítios, $U = 4$ e $U = 12$, com $V = 0$ e $V \neq 0$.

Comparando as figuras 2.1 e 2.2, podemos observar na figura 2.2 que no limite da banda de estados principal, de $-4 \leq E \leq 4$, a distância média tem valores altos. Dessa forma, a banda principal é governada por estados não-ligados. Contudo, no limite da primeira sub-banda (figuras 2.2a e 2.2c), tipicamente associada à interação local U , a distância média é próxima de

Figura 2.2: Distância média entre os dois elétrons para uma cadeia de 200 sítios, com $U = 4$, (2.2a e 2.2b) e $U = 12$ (2.2c e 2.2.d). Em cada caso temos ainda $V = 0$ e $V \neq 0$. Os resultados sugerem que os estados contidos nas sub-bandas sejam estados ligados de duas partículas.



Fonte: Autor (2018).

zero, indicando que essa sub-banda é formada por estados ligados. Com o surgimento da nova sub-banda, no caso em que $V \neq 0$ (figuras 2.2b e 2.2d), observa-se também a existência de estados ligados, visto que no limite dessas sub-bandas a distância média também apresenta valores baixos.

Também calculamos a função de correlação, definida por:

$$\zeta(E) = \overline{n_1 n_2} - \overline{n_1} \cdot \overline{n_2} \quad (2.27)$$

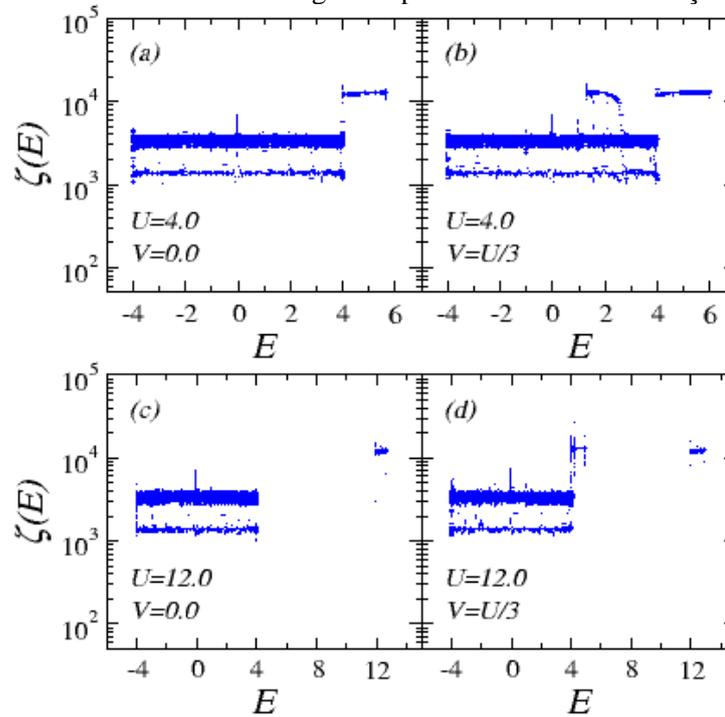
onde $\overline{n_1}$ e $\overline{n_2}$ são as posições médias dos elétrons, dadas por:

$$\overline{n_l} = \sum_{n_1, n_2} (n_l) |f_{n_1, n_2}|^2 \quad (2.28)$$

A função de correlação mede o grau de emaranhamento entre os elétrons. Assim, valores altos de correlação indicam estados ligados. Na figura 2.3 mostramos os resultados para ζ versus E .

Nas figuras 2.3a e 2.3c fica evidente a forte correlação entre os elétrons no limite da sub-banda associada a U . Na presença de interação não-local o mesmo comportamento é observado, mesmo quando a sub-banda está sobreposta à banda principal (ver figura 2.3b). Esse

Figura 2.3: Função de correlação entre os dois elétrons para uma cadeia de 200 sítios, com $U = 4$, (2.3a e 2.3b) e $U = 12$ (2.3c e 2.3.d). Em cada caso temos ainda $V = 0$ e $V \neq 0$. Os resultados mostram que os estados dentro das sub-bandas de estados ligados apresentam maior correlação.



Fonte: PEIXOTO, A.S. e DIAS, W.S. (2016) [45].

resultado sugere que os estados eletrônicos contidos nas sub-bandas são ligados. Isso fica mais evidente ao compararmos com a figura 2.2, corroborando a análise obtida através da distância média. Motivados por estes resultados, investigamos o problema analiticamente, como apresentado a seguir.

2.3 Análise Analítica

Afim de compreendermos melhor as bandas e sub-bandas de estados para nosso modelo, realizamos inicialmente um estudo analítico usando uma aproximação *tight-binding*. Para isso, consideramos todas as energias de interação elétron-íon nulas ($\epsilon_i = 0$), uma vez que a rede considerada é puramente cristalina [46,47]. Além disso, nós assumimos uma mudança para coordenadas de centro de massa dos dois elétrons na equação (2.24), usando:

$$f_{l,m} = e^{ik(l+m)a} \chi(l-m) \quad (2.29)$$

onde k é o momento do centro de massa e a é o espaçamento da rede, de modo que obtemos:

$$\begin{aligned}
E e^{ik(l+m)a} \chi(l-m) &= J [e^{ik(l+1+m)a} \chi(l+1-m) + e^{ik(l+m+1)a} \chi(l-m-1) \\
&+ e^{ik(l-1+m)a} \chi(l-1-m) + e^{ik(l+m-1)a} \chi(l-m+1)] \\
&+ [U \delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})] e^{ik(l+m)a} \chi(l-m) \\
E \chi(l-m) &= J (e^{ika} + e^{-ika}) [\chi(l-m-1) + \chi(l-m+1)] \\
&+ [U \delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})] \chi(l-m) \tag{2.30}
\end{aligned}$$

Usando $r = l - m$ e o fato de que $e^{ika} + e^{-ika} = 2 \cos(ka)$, então obtemos:

$$E \chi(r) = 2J \cos(ka) [\chi(r-1) + \chi(r+1)] + [U \delta_{r,0} + V(\delta_{r,-1} + \delta_{r,1})] \chi(r) \tag{2.31}$$

Assumimos também a existência de estados de paridade par e de paridade ímpar, sem perda de generalidade. Veremos agora a análise para algumas situações.

- No caso em que não há interação entre os elétrons, temos que $U = V = 0$. Logo, da equação (2.31) temos:

$$E \chi(r) = 2J \cos(ka) [\chi(r-1) + \chi(r+1)] \tag{2.32}$$

Na ausência de interação podemos fazer $\chi(r) = e^{irqa}$. Logo:

$$\begin{aligned}
E e^{irqa} &= 2J \cos(ka) [e^{i(r-1)qa} + e^{i(r+1)qa}] \\
E e^{irqa} &= 2J \cos(ka) e^{irqa} (e^{-iq a} + e^{iq a}) \\
E &= 4J \cos(ka) \cos(qa) \tag{2.33}
\end{aligned}$$

onde k e q são os momentos do centro de massa e a é o espaçamento da rede. Portanto, considerando os limites $\cos(ka) \cos(qa) = -1$ e $\cos(ka) \cos(qa) = 1$, a largura da banda de estados cristalinos está no intervalo $-4J \leq E \leq 4J$, concordando com as previsões apresentadas pelo modelo de Bloch e com as referências [35,46,47].

- Para o caso em que os autovetores têm paridade par, temos a relação $\chi(-r) = \chi(r)$, uma vez que a função de onda é simétrica. Logo, consideramos um parâmetro, tal que $\chi(r + 1) = \beta\chi(r)$. Portanto:

1. Para $r = 0$:

$$\begin{aligned}
 E\chi(0) &= 2J \cos(ka) [\chi(-1) + \chi(1)] + U\chi(0) \\
 E\chi(0) &= 4J\beta \cos(ka) \chi(0) + U\chi(0) \\
 E - U &= 4J\beta \cos(ka) \\
 \beta &= \frac{E - U}{4J \cos(ka)}
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

2. Para $r = 1$:

$$\begin{aligned}
 E\chi(1) &= 2J \cos(ka) [\chi(0) + \chi(2)] + V\chi(1) \\
 E\beta\chi(0) &= 2J \cos(ka) (1 + \beta^2)\chi(0) + V\beta\chi(0) \\
 (E - V)\beta &= 2J \cos(ka) (1 + \beta^2) \\
 \left(\beta + \frac{1}{\beta}\right) &= \frac{E - V}{2J \cos(ka)}
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Combinando as equações (2.34) e (2.35), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{E - V}{2J \cos(ka)} &= \frac{E - U}{4J \cos(ka)} + \frac{4J \cos(ka)}{E - U} \\
 \frac{E - V}{2J \cos(ka)} &= \frac{(E - U)^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}{(E - U)[4J \cos(ka)]} \\
 2(E - V)(E - U) &= (E - U)^2 + 16J^2 \cos^2(ka) \\
 2E^2 - 2VE - 2UE + 2UV &= E^2 - 2UE + U^2 + 16J^2 \cos^2(ka) \\
 E^2 - 2VE - [U^2 - 2UV + 16J^2 \cos^2(ka)] &= 0
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Fazendo $Z = U^2 - 2UV + 16J^2 \cos^2(ka)$, podemos resolver a equação (2.36):

$$E^2 - 2VE - Z = 0$$

$$\begin{aligned}
E &= \frac{-(-2V) \pm \sqrt{(-2V)^2 - 4(-Z)}}{2} \\
E &= \frac{2V \pm \sqrt{4V^2 + 4Z}}{2} \\
E &= \frac{2V \pm 2\sqrt{V^2 + U^2 - 2UV + 16J^2 \cos^2(ka)}}{2} \\
E &= V \pm \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2 \cos^2(ka)} \tag{2.37}
\end{aligned}$$

onde o sinal (\pm) depende do sinal de U . Entretanto, em nosso estudo apenas foi considerado o caso $U > 0$. Dessa forma, encontramos uma sub-banda de estados ligados com largura $U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$. Contudo, na ausência da interação V , a sub-banda passa a ter largura $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$, concordando com a referência [35], onde é apresentada apenas interação local. Logo, podemos notar que a existência de interação não-local ocasionou um alargamento da sub-banda tipicamente associada a U , corroborando o resultado mostrado na figura 2.1.

- Para o caso em que os autovetores têm paridade ímpar, temos a relação $\chi(-r) = -\chi(r)$ e, além disso, a probabilidade de dupla ocupação em qualquer sítio é nula. Neste caso $U = 0$. Logo, a equação (2.31) se reduz a:

$$E\chi(r) = 2J \cos(ka) [\chi(r - 1) + \chi(r + 1)] + V(\delta_{r,-1} + \delta_{r,1})\chi(r) \tag{2.38}$$

No caso $r = 0$ teremos uma solução trivial devido à assimetria da função de onda. Assim, para solucionar o problema nos casos em que $r \geq 1$, fizemos a mesma consideração usada no caso anterior, $\chi(r + 1) = \beta\chi(r)$. Portanto, temos:

1. Para $r = 1$:

$$\begin{aligned}
E\chi(1) &= 2J \cos(ka) [\chi(0) + \chi(2)] + V\chi(1) \\
E\chi(1) &= 2J \cos(ka) \beta\chi(1) + V\chi(1) \\
\beta &= \frac{E - V}{2J \cos(ka)} \tag{2.39}
\end{aligned}$$

2. Para $r = 2$:

$$\begin{aligned}
 E\chi(2) &= 2J \cos(ka) [\chi(1) + \chi(3)] \\
 E\beta\chi(1) &= 2J \cos(ka) (1 + \beta^2)\chi(1) \\
 \left(\beta + \frac{1}{\beta}\right) &= \frac{E}{2J \cos(ka)}
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

Combinando as equações (2.39) e (2.40), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{2J \cos(ka)} &= \frac{E - V}{2J \cos(ka)} + \frac{2J \cos(ka)}{E - V} \\
 \frac{V}{2J \cos(ka)} &= \frac{2J \cos(ka)}{E - V} \\
 EV - V^2 &= 4J^2 \cos^2(ka) \\
 E &= V + \frac{4J^2 \cos^2(ka)}{V}
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

Assim, encontramos uma nova sub-banda, cuja largura é $V \leq E \leq V + \frac{4J^2}{V}$, uma vez que $0 \leq \cos^2(ka) \leq 1$.

Os resultados sugerem que a interação não-local, resultado de um *screening* imperfeito, tem aspectos relevantes sobre os auto-estados eletrônicos. Uma das consequências é o alargamento da sub-banda de estados ligados, já conhecida da literatura [35,46,47], como mostrado nas expressões (2.42), para $V = 0$, e (2.43), para $V \neq 0$:

$$U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2} \tag{2.42}$$

$$U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2} \tag{2.43}$$

Outra consequência é o surgimento de uma nova sub-banda de estados ligados $\left(V \leq E \leq V + \frac{4J^2}{V}\right)$. Dessa forma, considerando $J = 1$, as sub-bandas associadas à interação local e à interação de primeiros vizinhos, respectivamente, têm largura:

a) $U = 4.0$ e $V \approx 1.33$:

$$4.0 \leq E \leq 1.33 + \sqrt{(4.0 - 1.33)^2 + 16 \cdot 1^2}$$

$$\mathbf{4.0 \leq E \leq 6.14}$$

$$1.33 \leq E \leq 1.33 + \frac{4 \cdot 1^2}{1.33}$$

$$\mathbf{1.33 \leq E \leq 4.34}$$

b) $U = 8.0$ e $V \approx 2.66$:

$$8.0 \leq E \leq 2.66 + \sqrt{(8.0 - 2.66)^2 + 16 \cdot 1^2}$$

$$\mathbf{8.0 \leq E \leq 9.33}$$

$$2.66 \leq E \leq 2.66 + \frac{4 \cdot 1^2}{2.66}$$

$$\mathbf{2.66 \leq E \leq 4.16}$$

c) $U = 12.0$ e $V = 4.0$:

$$12.0 \leq E \leq 4.0 + \sqrt{(12.0 - 4.0)^2 + 16 \cdot 1^2}$$

$$\mathbf{12.0 \leq E \leq 12.94}$$

$$4.0 \leq E \leq 4.0 + \frac{4 \cdot 1^2}{4.0}$$

$$\mathbf{4.0 \leq E \leq 5.0}$$

concordando com o resultado apresentado na figura 2.1.

A fim de compreender melhor o papel da interação não-local na dinâmica, investigamos também a evolução temporal do pacote de onda do ponto de vista numérico, como apresentado a seguir.

2.4 Análise Numérica: Aspectos Dinâmicos

O caráter dinâmico do pacote de onda de dois elétrons também foi estudado. Neste caso, resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i \frac{d}{dt} f_{l,m}(t) = f_{l+1,m}(t) + f_{l,m+1}(t) + f_{l-1,m}(t) + f_{l,m-1}(t) + [U\delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})]f_{l,m}(t) \quad (2.44)$$

onde foi considerado $J = \hbar = 1$ e $\epsilon_l = 0$. O cálculo das amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo pré-determinado pode ser obtido através de um algoritmo computacional, como o Runge-Kutta [54]. Entretanto, em nosso estudo empregamos um método numérico baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal, como nas referências [45,55]:

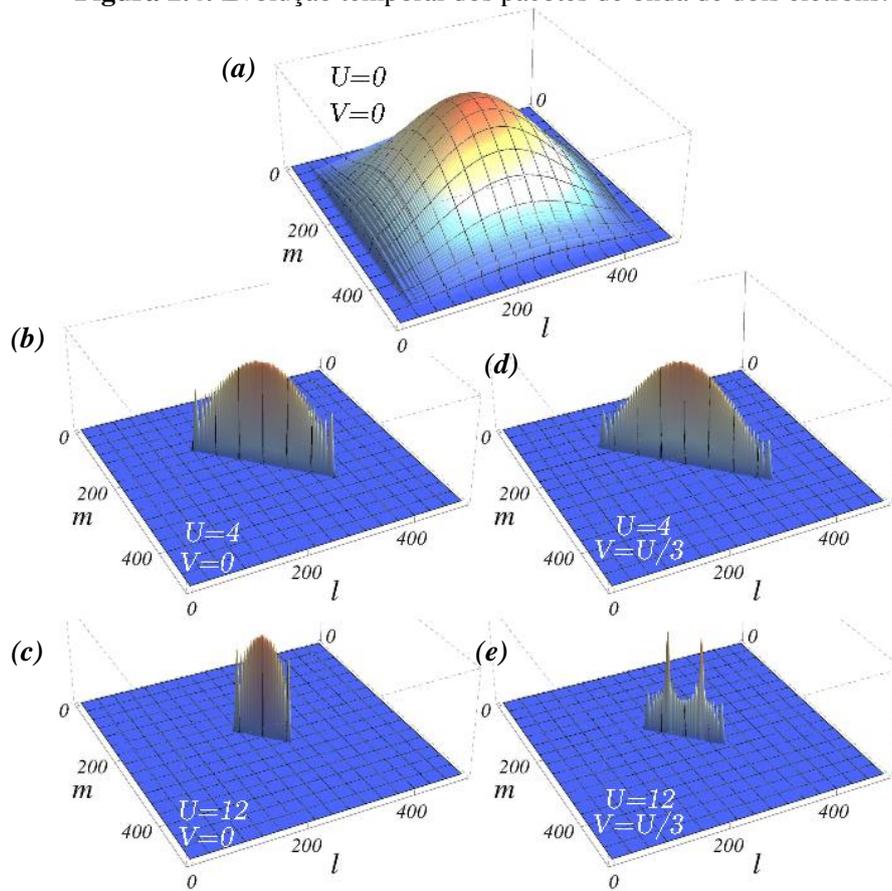
$$\Gamma(\Delta t) = e^{-i\mathcal{H}\Delta t} = 1 + \sum_n^{n_0} \frac{(-i\mathcal{H}\Delta t)^n}{n!} \quad (2.45)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema. Portanto, a função de onda após um incremento de tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = \Gamma(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$, de modo que usamos o método recursivamente para obter a função de onda após um tempo t . Os valores para ordem de truncamento $n_0 = 20$ e incremento de tempo $\Delta t = 0.07$ foram comprovados suficientes para conservar a norma da função de onda em todo o intervalo de tempo requisitado, dentro do limite $\sum |\phi_{l,m}(t)|_{borda}^2 < 10^{-30}$. Como condição inicial, consideramos um pacote de onda Gaussiano, com largura ρ :

$$\langle l, \sigma; m, \sigma' | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\rho)} \exp\left[-\frac{(l-l_0)^2}{4\rho^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{(m-m_0)^2}{4\rho^2}\right] \quad (2.46)$$

onde $A(\rho)$ é uma constante de normalização e l_0 e m_0 são, respectivamente, as posições iniciais dos elétrons 1 e 2. Consideramos os pacotes de onda, com largura $\rho = 1.0$, com posições iniciais $(l_0; m_0)$ respectivamente nos sítios $N/2 - d_0$ e $N/2 + d_0$, sendo N o tamanho da rede. A partir destas considerações, calculamos as quantidades físicas de interesse, obtendo informações sobre os auto-estados e evolução temporal do pacote de onda, como veremos a se-

Figura 2.4: Evolução temporal dos pacotes de onda de dois elétrons.



Fonte: PEIXOTO, A.S. e DIAS, W.S. (2016) [45].

guir.

Inicialmente investigamos a evolução temporal de um pacote de onda Gaussiano em uma rede unidimensional com 1000 sítios. A figura 2.4 mostra a evolução do pacote de onda dos dois elétrons no plano $l \times m$ após algum tempo. Os dois elétrons inicialmente estavam ocupando o mesmo sítio ($d_0 = 0$), localizados no centro da rede. Foram tomados diferentes valores de U (com $U = 0$, $U = 4$ e $U = 12$) na ausência e na presença de interação não-local V ($V = 0$ e $V = U/3$).

Na ausência de interação, os elétrons se movem de forma independente, preenchendo isotropicamente quase todo o plano $l \times m$. Na presença de interação ($U \neq 0$), o acoplamento elétron-elétron os torna correlacionados. Isso fez com que o pacote de onda ficasse concentrado em uma região diagonal ($l = m$) do plano. Ao aumentar o valor de U a correlação se tornou mais forte, restringindo o pacote a uma região menor, concordando com a literatura [56]. Contudo, a interação não-local V induz os elétrons a desenvolver uma dinâmica correlacionada ao longo de um segmento maior da rede. Foi mostrado anteriormente que na presença de V a sub-banda tipicamente associada a U sofre um alargamento. Além disso, uma nova sub-banda

de estados ligados, relacionada à interação de primeiros vizinhos entre os elétrons, emerge da banda de estados principal. Podemos observar nas figuras 2.4d e 2.4e, que a presença de interação não-local promove um aumento no comprimento do pacote, que pode ser interpretado como resultado do surgimento da banda de estados de primeiros vizinhos. Além disso, a mudança nas formas das estruturas apresentadas, para $V \neq 0$, ocorrem devido à modificação das correlações promovidas pela interação não-local.

Seguimos nossa investigação sobre o papel da interação não-local na dinâmica do pacote de onda. Para isso, calculamos a média temporal para um tempo muito longo:

- da probabilidade de dupla ocupação (*DOP – Double Occupancy Probability*), definida por:

$$\overline{DOP}(t) = \left\langle \sum_m |f_{m,m}(t)|^2 \right\rangle \quad (2.47)$$

- da probabilidade de ocupação de primeiro vizinho (*NOP – Nearest-neighbor Occupancy Probability*), definida por:

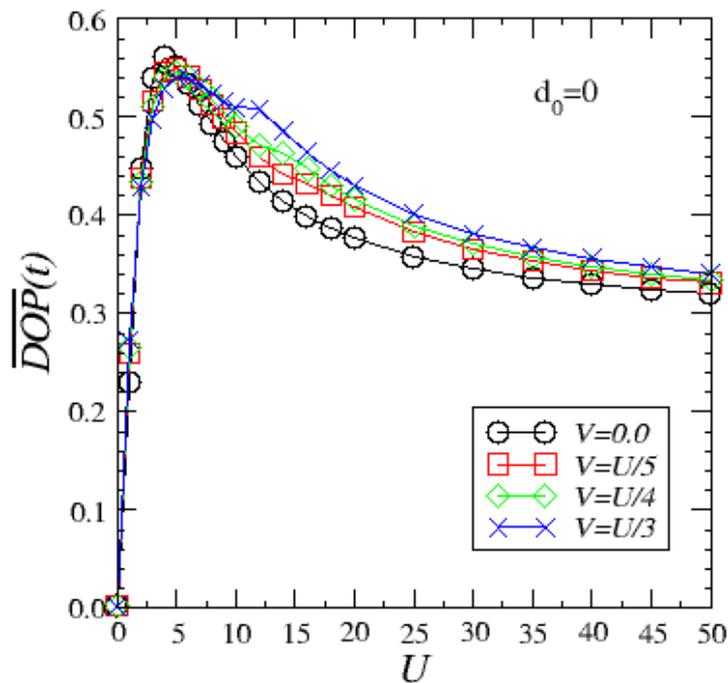
$$\overline{NOP}(t) = \left\langle \sum_{\substack{m,l \\ l=m\pm 1}} |f_{l,m}(t)|^2 \right\rangle \quad (2.48)$$

- da probabilidade de ocupação de segundo vizinho (*NNOP – Next-Nearest-neighbor Occupancy Probability*), definida por:

$$\overline{NNOP}(t) = \left\langle \sum_{\substack{m,l \\ l=m\pm 2}} |f_{l,m}(t)|^2 \right\rangle \quad (2.49)$$

A seguir serão discutidos os resultados obtidos para estas medidas a partir da evolução temporal de um pacote de onda de dois elétrons, com $d_0 = 0$, em uma rede puramente cristalina com $N = 1000$ sítios. Acompanhamos a evolução do pacote enquanto o efeito de borda foi desprezível ($\sum |f_{l,m}|^2_{borda} < 10^{-30}$). Além disso, ignoramos o período de tempo inicial, aproveitando as medidas após um transiente inicial, e tomamos a média temporal após um longo

Figura 2.5: Média temporal da probabilidade de dupla ocupação versus U . Observamos que o comportamento permanece semelhante. O acréscimo da DOP está associada ao alargamento da banda principal.

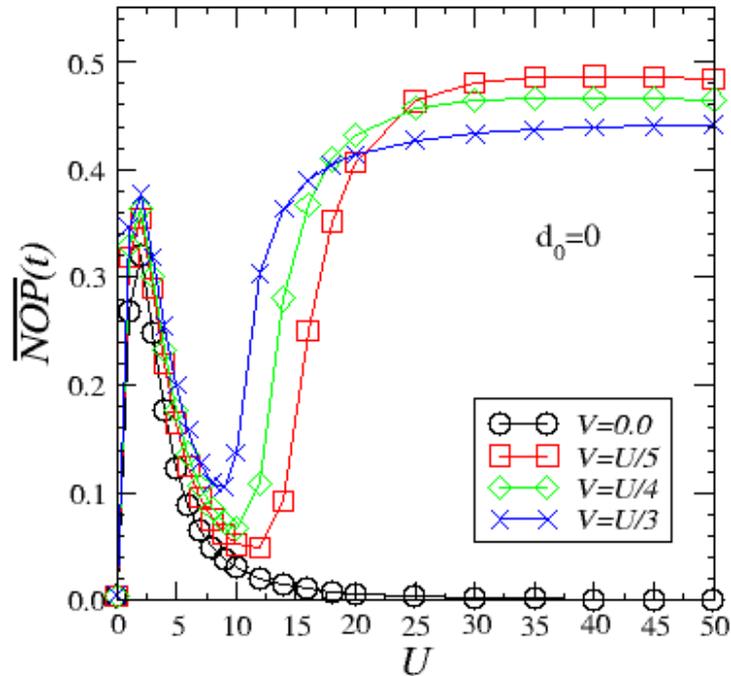


Fonte: PEIXOTO, A.S. e DIAS, W.S. (2016) [45].

tempo.

O primeiro aspecto analisado foi a probabilidade de dupla ocupação como função da interação U , com $V = 0$ e $V \neq 0$, mostrado na figura 2.5. Sempre que $U = 0$, os pacotes de onda dos dois elétrons se espalham independentemente, corroborando o resultado mostrado anteriormente na figura 2.4a. Contudo, na presença de U o surgimento da sub-banda de estados ligados correlaciona a dinâmica dos dois elétrons. O caráter não monotônico é oriundo da competição entre estados ligados e não ligados (estados puros) contidos no sistema. Para valores pequenos de interação, onde estados ligados e não ligados tem aproximadamente a mesma energia, o *hopping* coerente orientado pelos estados ligados é favorecido. Entretanto, a medida que a interação é aumentada, a sub-banda de estados ligados se estreita e se torna energeticamente distante dos estados não ligados, o que diminui sua relevância sobre a dinâmica das partículas. Também podemos ver que o valor máximo da $\overline{DOP}(t)$ ocorre em torno do valor de U correspondente à separação da sub-banda de estados ligados *on-site* da banda de estados principal. Além disso, o alargamento da sub-banda *on-site*, promovida pela presença de V , ocasiona um decaimento mais lento da $\overline{DOP}(t)$ em relação a U devido ao aumento da correlação entre os elétrons nos sítios vizinhos.

Figura 2.6: Média temporal da probabilidade de ocupação de primeiro vizinho versus U . Para V diferente de zero e fortes valores de interação observamos que a NOP não tende a zero a medida que U cresce.

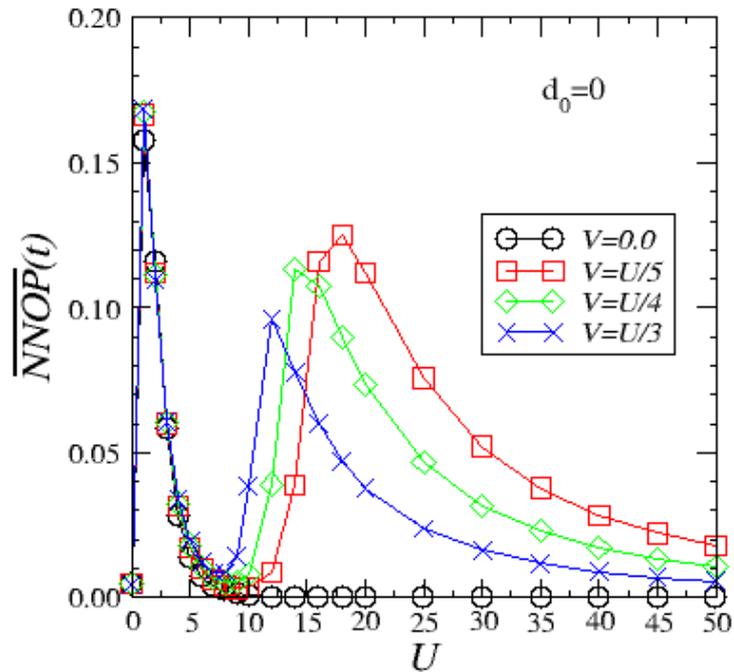


Fonte: PEIXOTO, A.S. e DIAS, W.S. (2016) [45].

Em seguida, analisamos a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos como função de U , apresentado na figura 2.6, onde também consideramos os casos $V = 0$ e $V \neq 0$. Para o caso em que $V = 0$ o comportamento de $\overline{NOP}(t)$ é consistente com o resultado apresentado anteriormente. À medida que U cresce, apenas os estados ligados em que os dois elétrons ocupam o mesmo sítio se correlacionam, fazendo com que $\overline{NOP}(t) = 0$ para interação forte. Contudo, a interação não-local é responsável por um comportamento diferente. A separação da nova sub-banda da banda principal favorece a ocupação de estados de primeiros vizinhos, resultando no aumento da $\overline{NOP}(t)$. Porém, o caráter repulsivo da interação elétron-elétron faz com que o valor da $\overline{NOP}(t)$ seja reduzido para valores maiores de V . O fato de que a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos permanece finita após um longo tempo indica a predominância do processo de *hopping* correlacionado de partículas ocupando sítios vizinhos.

Também foi analisado o comportamento da probabilidade de ocupação de segundos vizinhos como função da interação U , com $V = 0$ e $V \neq 0$. A figura 2.7 mostra os resultados obtidos. Podemos observar claramente a influência da separação das sub-bandas de estados li-

Figura 2.7: Média temporal da probabilidade de ocupação de segundo vizinho versus U . Fortes valores de interação favorecem a NOP, fazendo com que a NNOP diminua a medida que U cresce.



Fonte: PEIXOTO, A.S. e DIAS, W.S. (2016) [45].

gados da banda principal. O primeiro pico está relacionado à sub-banda *on-site*, enquanto que o segundo pico está relacionado à sub-banda de estados de primeiros vizinhos. O valor da $\overline{NNOP}(t)$ diminui para U forte, sinalizando uma predominância de um movimento coerente dos dois elétrons, mas apenas em sítios vizinhos.

3 OSCILAÇÕES DE BLOCH EM SISTEMAS DE ELÉTRONS INTERAGENTES: EFEITOS DA INTERAÇÃO LOCAL E NÃO-LOCAL

Para entender um pouco melhor a dinâmica de um elétron sob influência de um campo elétrico, vamos supor que temos uma banda ocupada por um único elétron. Em uma rede cristalina o espaço recíproco é dividido em zonas de Brillouin. Assim, após um longo intervalo de tempo, o elétron percorreria toda a extensão da 1ª Zona de Brillouin, até ser “refletido” de volta ao início. Esses movimentos são conhecidos como oscilações de Bloch e sua origem está no fato de que, na vizinhança dos pontos de máximo das bandas, a aceleração é contrária à força. Este fenômeno tem despertado grande interesse na comunidade acadêmica, sendo objeto de diversos estudos [35,39,40,41,57,58,59].

Contudo, a observação das oscilações de Bloch em metais comuns é muito difícil, uma vez que os elétrons colidem muito antes de realizar um ciclo completo pela Zona de Brillouin. Apesar disso, as oscilações de Bloch já foram observadas em sistemas artificiais de baixa dimensionalidade com uma super-periodicidade imposta pelo crescimento alternado de camadas de dois semicondutores com a mesma estrutura cristalina, conhecidos como *super-redes* [60,61]. Este fenômeno também foi observado experimentalmente em átomos de césio aprisionados em potenciais criados por ondas estacionárias de luz laser [62].

Neste capítulo iremos investigar a influência da interação, local e não-local, entre os elétrons sobre as oscilações de Bloch. Para isso, partiremos de uma abordagem semi-clássica e analisaremos o comportamento do elétron sob influência de um campo elétrico uniforme.

3.1 Oscilações de Bloch em Redes Unidimensionais

O fenômeno das oscilações de Bloch pode ser melhor compreendido através de uma abordagem semi-clássica. Essa abordagem consiste em obter as equações de posição \vec{r} e de momento \vec{p} . Isso pode ser feito empregando o formalismo clássico de Hamilton, quantizando o momento do elétron. Assim, temos:

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} \quad (3.1)$$

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}} \quad (3.2)$$

Quantizando o momento do elétron $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, onde \vec{k} é o vetor de onda, obtemos a velocidade de um pacote de onda. Da equação (3.1) temos:

$$\begin{aligned}\vec{v} &= \dot{\vec{r}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} \\ \vec{v} &= \frac{\partial [\epsilon(\vec{p}/\hbar) + \mathcal{V}(\vec{r})]}{\partial \vec{p}} \\ \vec{v} &= \frac{\partial \epsilon(\vec{p}/\hbar)}{\partial \vec{p}} \\ \vec{v} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}\end{aligned}\tag{3.3}$$

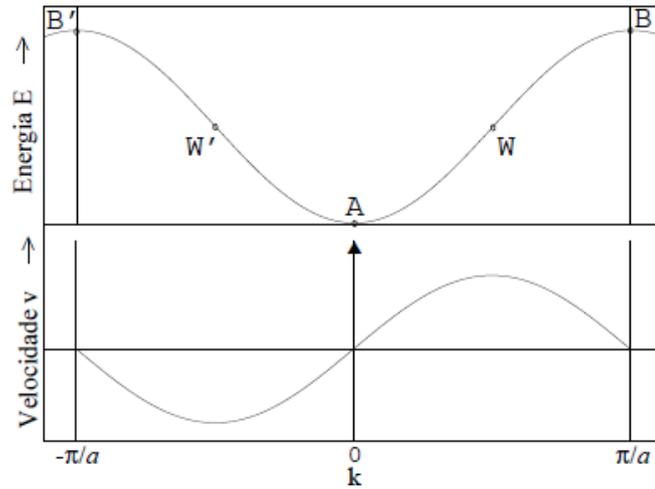
Já para a equação (3.2) temos:

$$\begin{aligned}\dot{\vec{p}} &= \hbar\dot{\vec{k}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}} \\ \hbar\dot{\vec{k}} &= -\frac{\partial [\epsilon(\vec{p}/\hbar) + \mathcal{V}(\vec{r})]}{\partial \vec{r}} \\ \hbar\dot{\vec{k}} &= -\frac{\partial \mathcal{V}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \\ \hbar\dot{\vec{k}} &= -\vec{\nabla} \mathcal{V}(\vec{r})\end{aligned}\tag{3.4}$$

onde $\mathcal{V}(\vec{r})$ é a energia potencial do elétron em um campo eletrostático uniforme. Portanto, na equação (3.4), o termo $\hbar\dot{\vec{k}}$ corresponde a uma força agindo sobre o elétron. Dessa forma, para um campo elétrico $\vec{\mathcal{F}}$:

$$\begin{aligned}\hbar\dot{\vec{k}} &= (-e)\vec{\mathcal{F}} \\ \vec{k}(t) &= \frac{(-e)\vec{\mathcal{F}}}{\hbar} t + \vec{k}_0\end{aligned}\tag{3.5}$$

Sendo o espaço \vec{k} dividido em zonas de Brillouin, em uma rede cristalina, a energia passa a apresentar uma dependência do vetor de onda ($\epsilon_n(\vec{k})$). A figura 3.1 esquematiza a dinâmica de um elétron em uma banda sob influência de um campo elétrico externo. No esque-

Figura 3.1: Dinâmica de um elétron em uma banda.

Fonte: Autor (2018).

ma mostrado, podemos ver que em uma zona completa, a energia $\epsilon_n(\vec{k})$ oscila entre $\epsilon(B')$, $\epsilon(A) = 0$ e $\epsilon(B)$. Além disso, a velocidade também muda de sinal periodicamente.

Agora, supondo que o vetor de onda \vec{k} esteja inicialmente em B' :

$$\vec{k}(0) = \vec{k}_0 = -\frac{\pi}{a} \quad (3.6)$$

Sendo o t_o o tempo para realizar uma oscilação, ou seja, o tempo para \vec{k} chegar em B , então da equação (3.5) temos:

$$\begin{aligned} \vec{k}(t_o) - \vec{k}_0 &= \frac{(-e)\vec{\mathcal{F}}}{\hbar} t_o \\ \frac{2\pi}{a} &= \frac{(-e)\mathcal{F}}{\hbar} t_o \\ \frac{2\pi}{t_o} &= \frac{(-e)\mathcal{F}a}{\hbar} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Logo, a frequência de oscilação é definida como:

$$\begin{aligned} \omega_o &= \frac{2\pi}{t_o} \\ \omega_o &= \frac{(-e)\mathcal{F}a}{\hbar} \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde E é a intensidade do campo elétrico externo, $-e$ é a carga elementar do elétron e a é o espaçamento da rede. Tomando $\hbar = a = -e = 1$, por simplicidade, então a *frequência das oscilações de Bloch* ω_B é:

$$\omega_B = \mathcal{F} \quad (3.9)$$

Dessa forma, temos que as oscilações de Bloch são da ordem do campo elétrico externo.

Para obter a largura das oscilações consideramos a equação (3.3):

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \\ \vec{r}(t_o) - \vec{r}_0 &= \frac{1}{\hbar} \frac{\delta \epsilon(\vec{k})}{\delta \vec{k}} t_o \\ \delta \vec{r} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\delta \epsilon(\vec{k})}{\delta \vec{k}} t_o \end{aligned} \quad (3.10)$$

Como $\delta \vec{k} = 2\pi/a$, e usando a equação (3.7), obtemos:

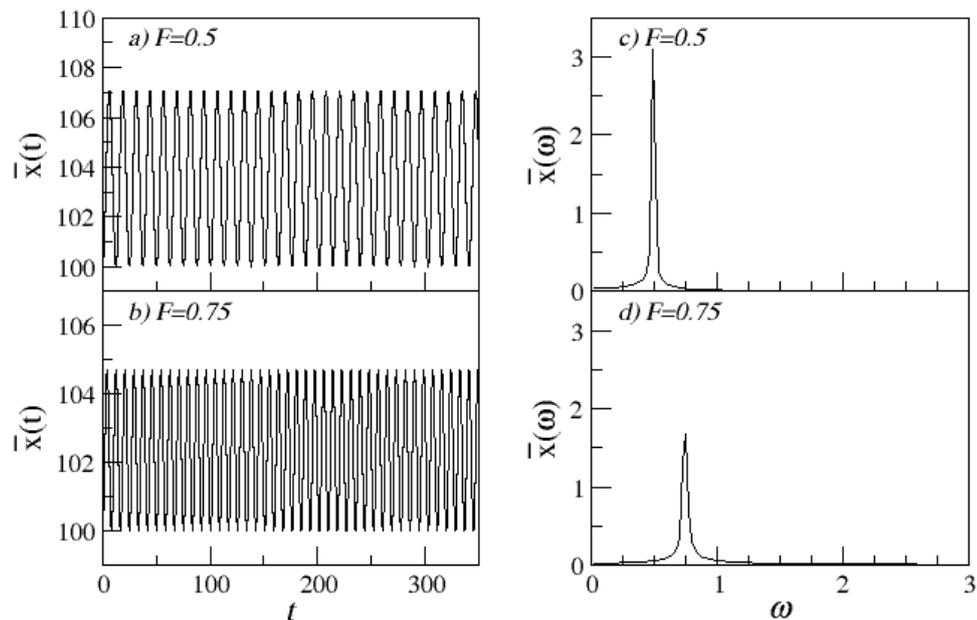
$$\begin{aligned} \delta \vec{r} &= \frac{1}{\hbar} \frac{a \delta \epsilon(\vec{k})}{2\pi} \frac{2\pi \hbar}{(-e)\mathcal{F}a} \\ \delta \vec{r} &= \frac{\delta \epsilon(\vec{k})}{(-e)\mathcal{F}} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Vemos assim que a amplitude das oscilações de Bloch é inversamente proporcional ao campo elétrico aplicado. Para entendermos um pouco melhor, consideramos aqui o caso de um elétron (sistemas de elétrons não interagentes) em uma cadeia cristalina com 200 sítios. Este sistema é descrito pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = J \sum_l (c_l^\dagger c_{l+1} + c_l^\dagger c_{l-1}) + e\mathcal{F}a \sum_l l c_l^\dagger c_l \quad (3.12)$$

onde J é o termo de *hopping*, \mathcal{F} é o campo elétrico, e é a carga do elétron e a é o espaçamento de rede. Aqui tomamos $J = e = a = 1$ e consideramos duas situações: uma em que o campo é

Figura 3.2: Centroide do pacote de onda de 1 elétron em uma rede cristalina. Podemos observar um comportamento oscilatório do elétron em (a e b) para diferentes intensidades de campo. As larguras e as frequências de oscilação (c e d) são condizentes com a previsão semi-clássica.

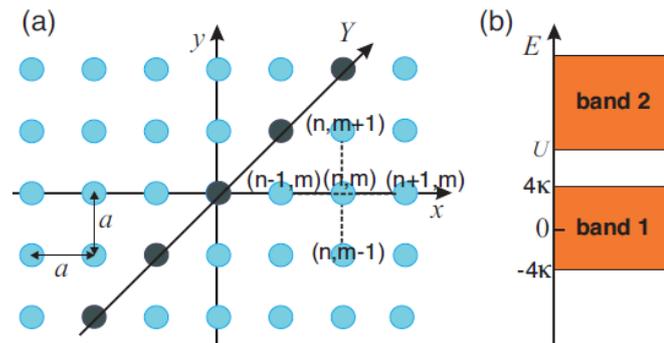


Fonte: Autor (2018).

0.5 e outra em que o campo é 0.75. Nossa condição inicial é um pacote de onda tipo gaussiano, posicionado no centro da cadeia. Através da equação de Schrödinger dependente do tempo, ao computarmos o centroide (figuras 3.2a e 3.2b) vemos claramente que os pacotes apresentam um comportamento oscilatório, restritos a uma pequena faixa da cadeia cuja largura é compatível com a expressão 3.11. Além disso, ao observarmos a transformada de Fourier destes centroides (ver figura 3.2c e 3.2d), os resultados corroboram a previsão semi-clássica descrita nas expressões 3.8 e 3.9.

Direcionando as atenções para sistemas de elétrons interagentes, estudos recentes [35,39,40] mostraram que a presença de interação entre os elétrons promove o surgimento de um fenômeno conhecido como *dobramento de frequência das oscilações de Bloch*. Em um trabalho publicado em 2007, Dias e colaboradores [35] mostraram um padrão oscilatório no movimento dos elétrons quando um campo elétrico externo é aplicado paralelamente à rede, onde a presença de interação local entre os elétrons promoveu uma diminuição da amplitude dessas oscilações. Os autores também analisaram os espectros de frequência, obtidos através da transformada de Fourier da evolução temporal dos centroides. Foi verificado que para $U = 0$ os elétrons oscilam com frequência $\omega = \mathcal{F}$ (frequência de Bloch), concordando com os argumentos semi-clássicos apresentados anteriormente. Contudo, para $U = 4$, surge um modo de oscilação dominante, de frequência $\omega = 2\mathcal{F}$, e outro pequeno, com frequência em torno de

Figura 3.3: (a) Esquema do arranjo fotônico para observações das oscilações de Bloch. (b) Estrutura das bandas na rede.



Fonte: LONGHI, S. (2011) [41].

$\omega = \mathcal{F}$. O primeiro resulta do movimento coerente entre os dois elétrons, enquanto que o outro pico menor é proveniente dos estados não-ligados, correspondente às oscilações não coerentes. Isso se deve ao fato de que os estados ligados promovem uma competição entre o movimento coerente e a repulsão entre os elétrons. Para $U = 4$, os elétrons oscilam coerentemente como se fossem uma única partícula de carga $-2e$, resultando no dobramento da frequência de oscilação [35].

A sub-banda de estados ligados tem como característica o deslocamento em energia e a redução da sua largura à medida que U cresce. Estas características dão origem a uma competição entre estados ligados e não ligados, de modo a surgir um regime em que a dinâmica coerente dos elétrons é favorecida (em torno de $U = 4$). Para $U = 10$ a largura da sub-banda de estados diminui, fazendo com que os estados não ligados predominem, resultando em uma reamplificação da frequência menor ($\omega = \mathcal{F}$).

Do ponto de vista experimental, o fenômeno do dobramento de frequência das oscilações de Bloch tem sido observado em arranjos fotônicos [40,41] e redes ópticas [39]. Um arranjo fotônico proposto por Longhi [41] em 2011, baseado na emissão de luz diagonal em uma guia de onda quadrada, simula o movimento de dois elétrons interagentes em uma rede unidimensional. Neste arranjo, a amplitude de *hopping* define o acoplamento das guias adjacentes e a interação entre os elétrons define os modos de propagação do feixe luminoso como esquematizado na figura 3.3. Baseado nessa proposta, Corrielli e colaboradores [40] realizaram experimentos onde foi possível observar as oscilações de Bloch.

O desenvolvimento de outros sistemas artificiais também possibilitou a observação do dobramento de frequência das oscilações de Bloch. Em 2015 foi reportado observações experimentais deste fenômeno em redes ópticas [39]. Os autores construíram um análogo óptico

para o Hamiltoniano de Bose-Hubbard, onde átomos ultrafrios de ^{87}Rb fazem caminhada quântica confinados em uma rede unidimensional.

3.2 Modelo

Diante da fenomenologia apresentada, estudamos também a dinâmica de dois elétrons interagentes em redes cristalinas, sujeitas a um campo elétrico externo e constante, alinhado paralelamente à rede. Para isso, primeiro acrescentamos um termo referente ao campo ao Hamiltoniano de nosso sistema, reescrevendo a equação (2.1) como:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle lm \rangle} \sum_{\sigma} c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} + U \sum_l \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{l,2} + V \sum_{\langle lm \rangle} \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{m,2} + \sum_{l,m} \sum_{\sigma} (\epsilon_l + e\mathcal{F}l) \hat{n}_{l,\sigma} \quad (3.13)$$

onde $c_{l,\sigma}^{\dagger}$ e $c_{l,\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação para uma partícula com *spin* $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ e sítio l , com $\hat{n}_{l,\sigma} = c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma}$, $\langle lm \rangle$ denota o primeiro vizinho, J é o termo cinético, U é a interação local, V é a interação de primeiros vizinhos, ϵ_l é a energia de interação elétron/íon no sítio l , e é a carga do elétron, \mathcal{F} é o campo elétrico externo e l é o sítio. Dessa forma, usando as mesmas considerações mostradas no capítulo 2, a equação de Schrödinger dependente do tempo se torna:

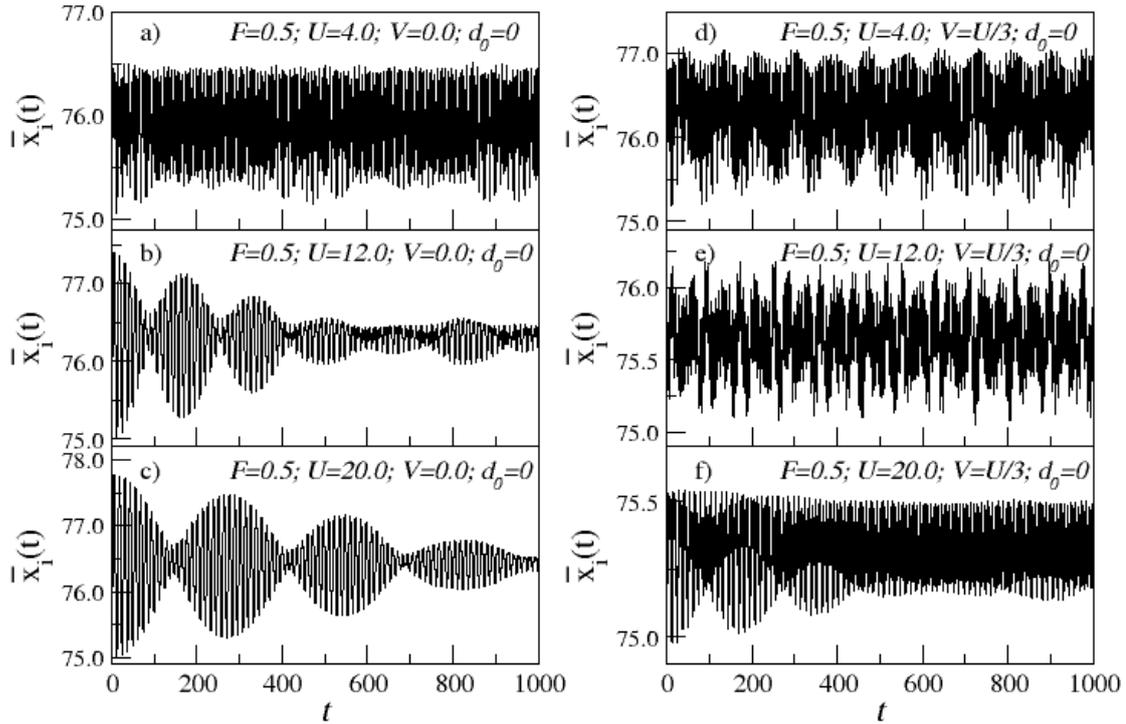
$$i \frac{d}{dt} f_{l,m}(t) = f_{l+1,m}(t) + f_{l,m+1}(t) + f_{l-1,m}(t) + f_{l,m-1}(t) \\ + [\mathcal{F}(l+m) + U\delta_{l,m} + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})] f_{l,m}(t) \quad (3.14)$$

onde foram usadas as aproximações $J = \hbar = e = 1$ e, considerando a rede puramente cristalina, $\epsilon_l = \epsilon_m = 0$. Assim, obtemos os estados eletrônicos empregando um método numérico baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal, como na seção 2.2.3.

3.3 Resultados

Como visto anteriormente, na presença de interação local, os estados ligados promovem uma dinâmica coerente das partículas, resultando em modos de oscilações em que se observa um dobramento da frequência das oscilações de Bloch. Isso nos motivou a investigar o papel

Figura 3.4: Centroide de 1 elétron na presença de campo externo ($\mathcal{F} = 0.5$), inicialmente no centro da rede ($i_0 = 75$), para $U = 4$, $U = 12$ e $U = 20$, com $V = 0$ (figuras *a*, *b* e *c*) e $V \neq 0$ (figuras *d*, *e* e *f*).



Fonte: Autor (2018).

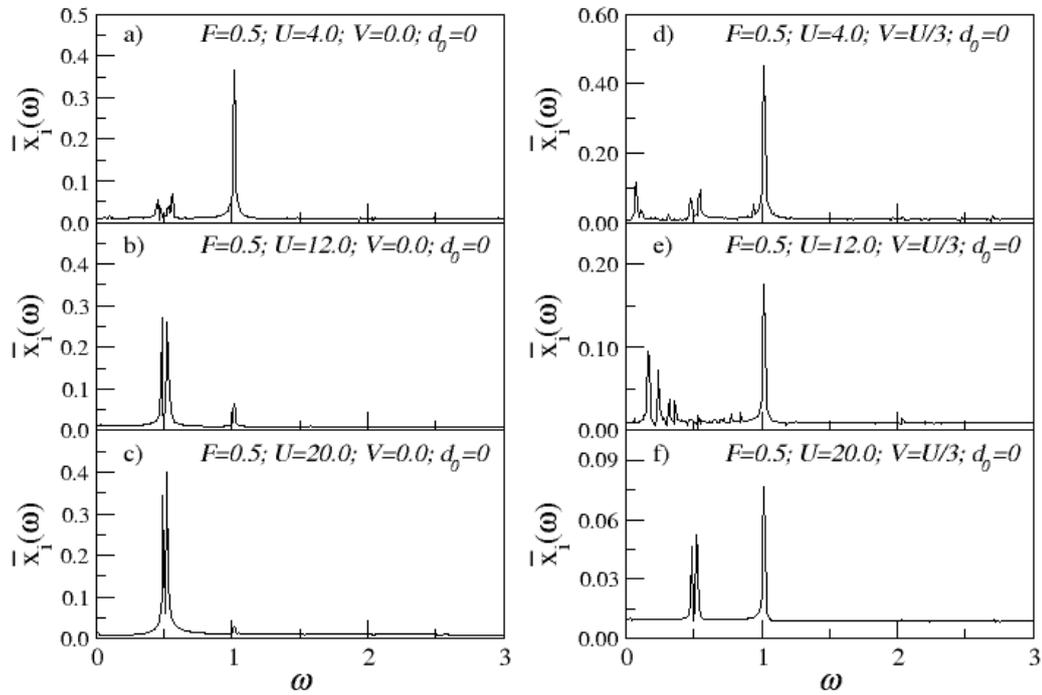
da interação de primeiros vizinhos no movimento dos elétrons, ao aplicar um campo elétrico externo sobre uma rede cristalina.

Assim, a partir da equação 3.13 aplicamos os mesmos métodos numéricos apresentados anteriormente, na seção 2.2.3. Calculamos as amplitudes de probabilidade da função de onda após cada incremento de tempo, onde foi utilizado um algoritmo computacional baseado na expansão de Taylor do operador de evolução temporal, como nas referências [45,55]. Com esta implementação numérica investigamos o padrão de oscilação do centroide do pacote de onda, definido pela posição média do elétron:

$$\bar{x}_i(t) = \sum_{l,m} x_i |f_{l,m}(t)|^2 \quad (3.15)$$

com $i = 1,2$. Para isso, consideramos uma cadeia com $N = 150$ sítios, os elétrons inicialmente ocupando o mesmo sítio no centro da rede ($l_0 = m_0 = 75$), campo externo $\mathcal{F} = 0.5$, $U = 4$, 12 e 20, com $V = 0$ e $V = U/3$. Como visto anteriormente, a presença de interação local promove o dobramento de frequência das oscilações de Bloch. Dessa forma, nosso objetivo central é investigar o papel da interação de primeiros vizinhos nesse fenômeno. Na figura 3.4

Figura 3.5: Espectros de frequência para as oscilações do pacote de onda de dois elétrons na presença de campo externo ($\mathcal{F} = 0.5$), inicialmente no centro da rede ($i_0 = 75$), para $U = 4$, $U = 12$ e $U = 20$, com $V = 0$ (figuras *a*, *b* e *c*) e $V \neq 0$ (figuras *d*, *e* e *f*).



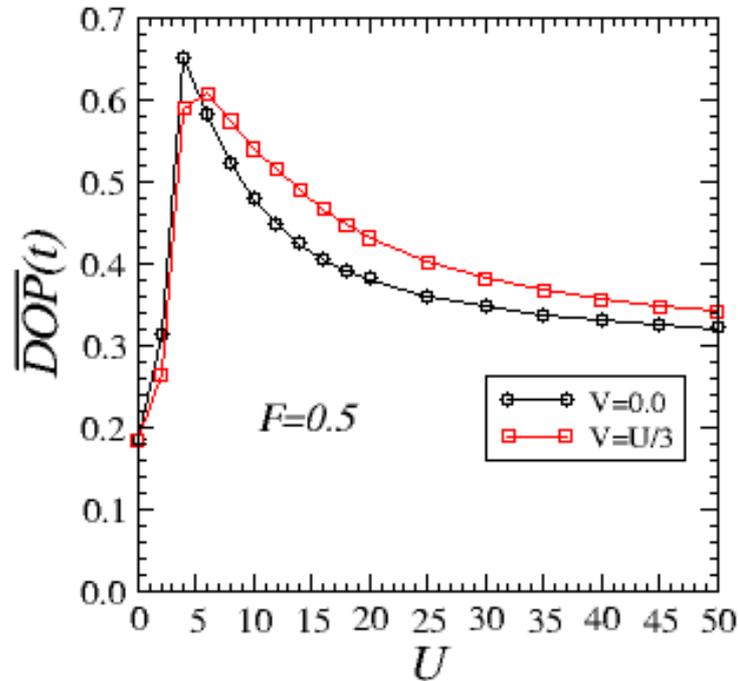
Fonte: Autor (2018).

acompanhamos a evolução temporal do centroide, com os elétrons inicialmente ocupando o mesmo sítio no centro da rede.

Para o caso $U = 4$, ao comparar as figuras 3.4a e 3.4d podemos observar um leve aumento na amplitude de oscilação no caso em que $V \neq 0$. Contudo, para $U = 12$ e $U = 20$, a presença de interação não-local promove uma diminuição nas amplitudes de oscilação. Esse comportamento está relacionado as sub-bandas de estados ligados associadas à interação de primeiros vizinhos: para uma interação mais forte, o pacote ainda está sob influência dos estados ligados, predominando o movimento coerente entre os elétrons. Além disso, neste momento, além da banda de estados ligados do tipo *on-site* (que foi alargado devido a interação não-local), há também a sub-banda de estados não-ligados de primeiros vizinhos. Com dois tipos de estados ligados e estados não ligados, fenômenos competitivos resultam num padrão oscilatório não tão regular.

Também analisamos as frequências de oscilação. A figura 3.5 mostra os respectivos espectros de frequência para as oscilações apresentadas na figura 3.4. Para $U = 4$, observamos o surgimento de modos de baixa frequência, não coincidentes com o modo de frequência independente (próximo de 0.5), no caso em que $V \neq 0$. Este comportamento está relacionado

Figura 3.6: Probabilidade de dupla ocupação. A interação é responsável por oscilações coerentes quando os elétrons ocupam o mesmo sítio.

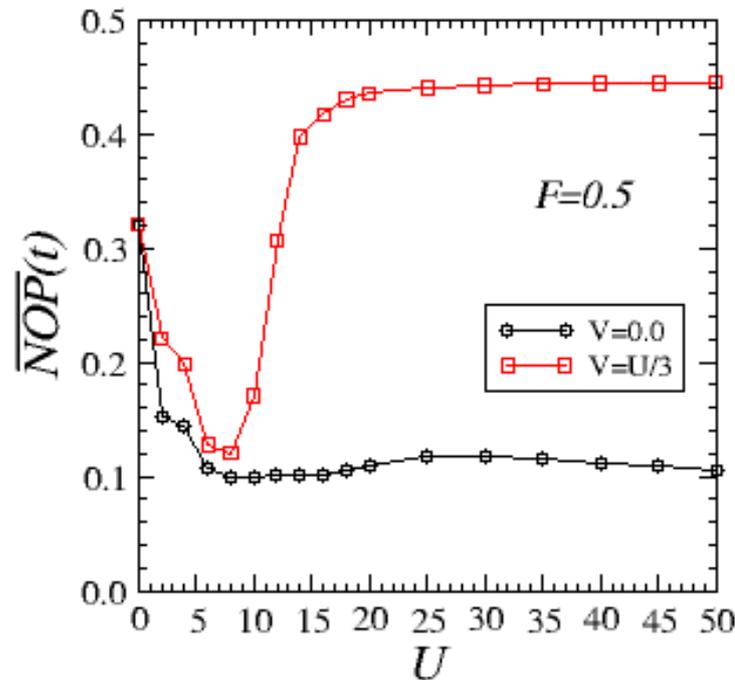


Fonte: Autor (2018).

com a emergência de estados ligados de primeiros vizinhos, que estão, nesta configuração, degenerados com os estados não-ligados da banda principal. Esse fenômeno competitivo promove oscilações não coerentes, induzindo o espectro observado. Para $U = 12$ estes fenômenos competitivos ainda existem, apesar da sub-banda de estados ligados já estar quase totalmente desacoplada da banda principal (formada por estados não-ligados). Porém, um importante resultado aqui é a manutenção do dobramento de frequência das oscilações de Bloch de forma predominante. Isso reforça a ideia de fenômeno de dobramento de frequências ser oriundo de oscilações coerentes, que agora estariam relacionadas à interação de primeiros vizinhos. À medida que consideramos um valor de interação ainda mais alto, temos as duas sub-bandas de estados ligados desacopladas da banda principal. Assim, as competições entre estados ligados e não-ligados são reduzidas, resultando num espectro de baixa frequência condizente com o de oscilações não coerentes (elétrons independentes). Além disso, observa-se ainda a permanência da frequência dobrada como frequência predominante, fortalecendo a ideia de que há um regime de oscilações coerentes ocupando predominantemente o mesmo sítio, bem como regime de oscilações coerentes ocupando predominantemente sítios vizinhos.

Com o intuito de verificar tais suposições, apresentamos a análise das probabilidades de dupla ocupação ($\overline{DOP}(t)$), de ocupação de primeiros vizinhos ($\overline{NOP}(t)$) e de ocupação de segundos vizinhos ($\overline{NNOP}(t)$). A seguir serão discutidos os resultados obtidos para estas me-

Figura 3.7: Probabilidades de ocupação de primeiros vizinhos. Devido às oscilações coerentes provenientes da interação não-local quando os elétrons ocupam sítios vizinhos, a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos permanece finita para interação forte.



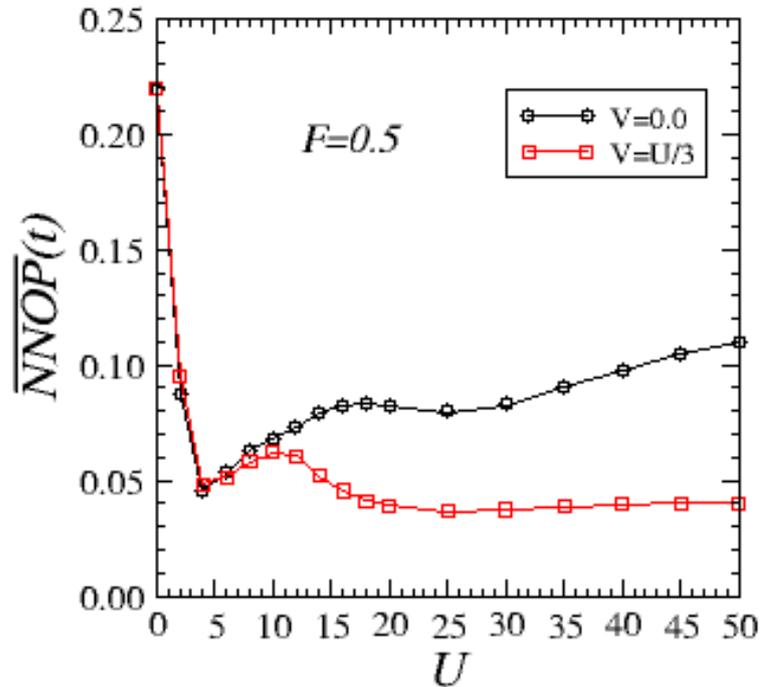
Fonte: Autor (2018).

didadas a partir da evolução temporal de um pacote de onda de dois elétrons, com $d_0 = 0$, em uma rede puramente cristalina com 250 sítios, com os elétrons inicialmente ocupando o mesmo sítio no centro da rede ($l_0 = m_0 = 125$) e campo externo $\mathcal{F} = 0.5$. Além disso, ignoramos o período de tempo inicial, aproveitando as medidas após um transiente inicial, e tomamos a média temporal após um longo tempo.

Ao verificarmos a probabilidade de dupla ocupação (figura 3.6), observamos o mesmo comportamento não monotônico encontrado no caso em que não há campo elétrico externo (figura 2.5). Como visto anteriormente, esse comportamento é proveniente da competição entre estados ligados e não-ligados contidos no sistema. Além disso, para $U = 0$ a probabilidade é maior que no caso sem campo. Isso se explica pelo fato de que na presença de um campo externo os elétrons oscilam em torno de sua posição inicial. Assim, para $U = 0$ pode ocorrer uma “superposição” dos pacotes de onda dos dois elétrons, induzindo esse comportamento.

Também analisamos a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos (figura 3.7), onde observamos um comportamento semelhante ao caso sem campo externo (ver figura 2.6). Novamente podemos observar que a separação da nova sub-banda, associada a V , da banda principal favorece a ocupação de estados de primeiros vizinhos, resultando no aumento da probabilidade. Para $V \neq 0$ a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos, após um longo

Figura 3.8: Probabilidades de ocupação de segundos vizinhos. Mesmo sob ação de um campo elétrico, a interação forte favorece a ocupação de sítios vizinhos, resultando na diminuição da $\overline{NNOP}(t)$.



Fonte: Autor (2018).

tempo, permanece com valor finito, indicando a predominância de oscilações coerentes enquanto as partículas ocupam sítios vizinhos. Dessa forma, o sistema continua a ser governado por estados ligados, resultando na manutenção do dobramento de frequência das oscilações de Bloch, corroborando os resultados mostrados anteriormente (ver figura 3.5).

Em seguida analisamos probabilidade de ocupação de segundos vizinhos (figura 3.8). No caso em que $V \neq 0$ observamos um comportamento relacionado às sub-bandas. Após uma diminuição da probabilidade de ocupação de segundos vizinhos, observamos a formação de um “pico” em torno de $U = 10$ (quando a segunda sub-banda está desacoplando da banda principal). A probabilidade agora diminui para U forte, sinalizando uma predominância de um movimento coerente dos dois elétrons, mas apenas em sítios vizinhos.

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho de Doutorado estudamos a natureza dos auto-estados de dois elétrons em uma cadeia puramente cristalina. Inicialmente consideramos um Hamiltoniano de dois elétrons distinguíveis por *spin*, apenas, e itinerantes em uma cadeia cristalina unidimensional. Os elétrons interagem com os íons da rede e entre si, de modo que a interação elétron-elétron ocorre quando eles ocupam o mesmo sítio ou quando ocupam sítios vizinhos. Para conduzir nosso trabalho, apresentamos inicialmente uma revisão sobre modelos de condução eletrônica, onde abordamos as ferramentas teóricas necessárias ao nosso estudo. Em seguida, descrevemos o formalismo físico-matemático empregado em nosso estudo, de onde obtivemos as equações de Schrödinger dependente e independente do tempo. Os principais resultados deste trabalho foram publicados em 2016 [45].

Através de um método numérico de diagonalização direta, utilizando rotinas LAPACK [53], encontramos os autovalores de energia para uma cadeia puramente cristalina de $N = 200$ sítios. Visando investigar a influência da interação eletrônica sobre os auto-estados, calculamos a densidade de estados normalizada. Verificamos que na presença de interação local uma sub-banda de estados é formada, inicialmente se destacando da banda de estados principal para $U = 4$, sendo também observada para $U = 12$. Essas sub-bandas apresentaram largura no intervalo $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$, concordando com a previsão analítica e com as referências encontradas na literatura [35,46,47]. A presença de interação não-local promoveu um alargamento dessa sub-banda, que passou a apresentar largura $U \leq E \leq V + \sqrt{(U - V)^2 + 16J^2}$ [46,47]. Além disso, no caso em que $V \neq 0$ observamos o surgimento de uma nova sub-banda, com largura $V \leq E \leq V + \frac{4J^2}{V}$, que emergiu da banda de estados principais para um valor de interação mais forte. Assim, para compreender melhor a natureza dessa nova sub-banda calculamos a distância média entre os elétrons e a função de correlação. Verificamos um alto valor de correlação nas faixas de energia correspondente às duas sub-bandas, quando comparadas com a banda principal, caracterizando-as como sub-bandas de estados ligados e corroborando os resultados obtidos para a distância média.

Seguimos nosso estudo analisando o papel da interação não-local na dinâmica de nosso sistema. Desta forma investigamos a dinâmica temporal de um pacote de onda de dois elétrons, inicialmente localizados no centro da cadeia. Verificamos que os estados ligados promovem um movimento coerente dos elétrons, onde a interação local é responsável por induzir uma dinâmica correlacionada em que os elétrons ocupam predominantemente o mesmo sítio,

enquanto que a interação de primeiros vizinhos se mostra capaz de induzir um movimento coerente onde os elétrons são mantidos em sítios vizinhos [56]. O movimento coerente entre os elétrons apresenta um comportamento não monotônico como função da interação local U .

Investigamos também a dinâmica do sistema sob ação de um campo elétrico externo. Inicialmente foi observado que na presença de campo elétrico uniforme, no caso sem interação, as partículas oscilam em torno de suas posições iniciais. Além disso, a interação local promove um movimento coerente entre as partículas, resultando no surgimento de modos de oscilação com frequência dobrada [35,41,56]. A interação de primeiros vizinhos faz com que a oscilação do centroide seja um pouco irregular. Este comportamento está relacionado com a emergência de estados ligados de primeiros vizinhos, promovendo também o surgimento de um modo de baixas frequências associadas a essas oscilações irregulares. Analisando a probabilidade de ocupação de primeiros vizinhos, para $V \neq 0$, observamos a predominância de oscilações coerentes enquanto as partículas ocupam sítios vizinhos. Portanto, o sistema continua a ser governado por estados ligados, resultando na manutenção do dobramento de frequência das oscilações de Bloch, mesmo para interações mais fortes.

Motivados pelo fenômeno do enfraquecimento da localização de Anderson, relatado nas referências, pretendemos posteriormente investigar o papel das interações local e não-local sobre a dinâmica de sistemas desordenados. Também pretendemos abordar um modelo em que a interação seja governada por uma lei de potência, onde a força do acoplamento elétron-elétron diminui à medida que os elétrons se afastam um do outro.

REFERÊNCIAS

- [1]. THOMSON, J. J. Cathode Rays. **Philosophical Magazine**, 44, Outubro 1897. 293-316.
- [2]. DRUDE, P. Zur Elektronentheorie der Metalle. **Annalen der Physik**, 306, n. 3, 1900. 566-613.
- [3]. DRUDE, P. Zur Elektronentheorie der Metalle; II. Teil. Galvanomagnetische und thermomagnetische Effecte. **Annalen der Physik**, 308, n. 11, 1900. 369-402.
- [4]. ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. [S.l.]: Cengage Learning, 2011.
- [5]. KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. 8^a. ed. [S.l.]: Wiley, 2004.
- [6]. BLOCH, F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. **Zeitschrift Für Physik**, 52, Julho 1929. 555-600.
- [7]. MOTT, N. F.; PEIERLS, R. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. **Proceedings of the Physical Society of London**, 49, 1937. 72.
- [8]. MOTT, N. F. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals. **Proceedings of the Physical Society A**, 62, Abril 1949. 416-422.
- [9]. SHEPELYANSKY, D. L. Coherent Propagation of Two Interacting Particles in a Random Potential. **Physical Review Letters**, 73, Novembro 1994. 2607-2610.
- [10]. IMADA, M.; FUJIMORI, A.; TOKURA, Y. Metal-insulator transitions. **Reviews of Modern Physics**, 70, Outubro 1998. 1039-1263.
- [11]. MÜLLER-GROELING, A.; WEIDENMÜLLER, H. A.; LEWENKOPF, C. H. Interacting Electrons in Mesoscopic Rings. **Europhysics Letters**, 22, 1993.
- [12]. ABRAHAM, M.; BERKOVITS, R. Persistent currents in an interacting 1d disordered ring: Manifestations of the Mott-Hubbard transition. **Physical Review Letters**, 70, 1993. 1509.
- [13]. TIPLER, P. A.; MOSCA, G. **Física para Cientistas e Engenheiros: Mecânica, Oscilações e Ondas, Termodinâmica**. 5^a. ed. [S.l.]: LTC, v. 1, 2006.
- [14]. OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. D. **Introdução à Física do Estado Sólido**. 1^a. ed. [S.l.]: Livraria da Física, 2005.
- [15]. YU, Z. et al. One-Way Electromagnetic Waveguide Formed at the Interface between a Plasmonic Metal under a Static Magnetic Field and a Photonic Crystal. **Physical Review Letters**, 100, Janeiro 2008.

- [16]. FAN, S.; JOANNOPOULOS, J. D. Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs. **Physical Review B**, 65, Junho 2002.
- [17]. ALLEN, P. B. et al. Recovering hidden Bloch character: Unfolding electrons, phonons, and slabs. **Physical Review B**, 87, Fevereiro 2013.
- [18]. ANDERSON, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. **Physical Review**, 109, n. 5, Março 1958. 1492-1505.
- [19]. LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. V. Disordered electronic systems. **Reviews of Modern Physics**, 57, n. 2, Abril 1985. 287-337.
- [20]. THOULESS, D. J. Electrons in Disordered System and the Theory of Localization. **Physics Reports**, 73, Abril 1974. 93-142.
- [21]. ABRAHAMS, E. et al. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. **Physical Review Letters**, v. 42, p. 673-676, mar. 1979.
- [22]. MOTT, N. F. Metal-Insulator Transition. **Reviews of Modern Physics**, 40, Outubro 1968. 677-683.
- [23]. BULUTA, I.; NORI, F. Quantum Simulators. **Science**, 326, Outubro 2009. 108-111.
- [24]. HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proceedings of the Royal Society A**, 276, Novembro 1963. 238-257.
- [25]. EDITORIAL. The Hubbard model at half a century. **Nature Physics**, 2013.
- [26]. ESTERLING, D. M.; LANGE, R. V. Degenerate Mass Operator Perturbation Theory in the Hubbard Model. **Reviews of Modern Physics**, 40, 1 Outubro 1968. 796-799.
- [27]. ZHANG, G.; PAVARINI, E. Mott transition, spin-orbit effects, and magnetism in Ca_2RuO_4 . **Physical Review B**, 95, Fevereiro 2017.
- [28]. KOHNO, M. Characteristics of the Mott transition and electronic states of high-temperature cuprate superconductors from the perspective of the Hubbard model. **Reports on Progress in Physics**, 81, Fevereiro 2018.
- [29]. YAMAKAWA, H. et al. Mott transition by an impulsive dielectric breakdown. **Nature Materials**, Agosto 2017.
- [30]. DIAS, W. S.; LYRA, M. L. Non monotonic influence of Hubbard interaction on the Anderson localization of two-electron wavepackets. **Physica A**, 411, Junho 2014. 35-41.
- [31]. LIEB, E. H.; LINIGER, W. Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State. **Physical Review**, 130, Maio 1963. 1605-1616.

- [32]. LIEB, E. H. Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum. **Physical Review**, 130, Maio 1963. 1616-1624.
- [33]. LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-range, One-band Model in One Dimension. **Physical Review Letters**, 20, Junho 1968. 1445-1448.
- [34]. LIEB, E. H.; WU, F. Y. The one-dimensional Hubbard model: a reminiscence. **Physica A**, 321, 2003.
- [35]. DIAS, W. S. et al. Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field. **Physical Review B**, 76, Outubro 2007.
- [36]. SRINIVASAN, B.; BENENTI, G.; SHEPELYANSKY, D. L. Delocalizing effect of the Hubbard repulsion for electrons on a two-dimensional disordered lattice. **Physical Review B**, 60, n. 20, 30 Maio 2003.
- [37]. HENSELER, P.; KROHA, J.; SHAPIRO, B. Static screening and delocalization effects in the Hubbard-Anderson model. **Physical Review B**, 77, Fevereiro 2008.
- [38]. SONG, Y.; WORTIS, R.; ATKINSON, W. A. Dynamical mean field study of the two-dimensional disordered Hubbard model. **Physical Review B**, 77, Fevereiro 2008.
- [39]. PREISS, P. M. et al. Strongly correlated quantum walks in optical lattices. **Science**, 347, Março 2015. 1229-1233.
- [40]. CORRIELLI, G. et al. Fractional Bloch oscillations in photonic lattices. **Nature Communications**, 4, Março 2013.
- [41]. LONGHI, S. Photonic Bloch oscillations of correlated particles. **Optics Letters**, 36, Agosto 2011. 3248-3250.
- [42]. SCHÜLER, M. et al. Optimal Hubbard Models for Materials with Nonlocal Coulomb Interactions: Graphene, Silicene, and Benzene. **Physical Review Letters**, 111, Julho 2013.
- [43]. HUANG, L. et al. Extended dynamical mean-field study of the Hubbard model with long-range interactions. **Physical Review B**, 90, Novembro 2014.
- [44]. LOON, E. G. C. P. V. et al. Capturing nonlocal interaction effects in the Hubbard model: Optimal mappings and limits of applicability. **Physical Review B**, 94, Outubro 2016.
- [45]. PEIXOTO, A. S.; DIAS, W. S. The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk. **Solid State Communications**, 242, Setembro 2016. 68-73.

- [46]. WEISZ, J. F.; CLARO, F. Pair formation in two-electron correlated chains. **Journal of Physics: Condensed Matter**, 15, Maio 2003. 3213-3216.
- [47]. CLARO, F.; WEISZ, J. F.; CURILEF, S. Interaction-induced oscillations in correlated electron transport. **Physical Review B**, 67, Maio 2003.
- [48]. LOON, E. G. C. P. V.; KATSNELSON, M. I. The extended Hubbard model with attractive interactions. **Journal of Physics: Conference Series**, 1136, 2018.
- [49]. TERLETSKA, H.; CHEN, T.; GULL, E. Charge ordering and correlation effects in the extended Hubbard model. **Physical Review B**, 95, Março 2017.
- [50]. LITTLEWOOD, P. B. Collective modes and superconductivity in an extended Hubbard model for copper oxide superconductors. **Physical Review B**, 42, n. 16, 1 dez. 1990. 10075-10089.
- [51]. GU, S.-J. et al. Entanglement and Quantum Phase Transition in the Extended Hubbard Model. **Physical Review Letters**, 93, n. 8, 20 ago. 2004. 93-101.
- [52]. VALENZUELA, B.; VOZMEDIANO, M. A. H. Deformation of the Fermi surface in the extended Hubbard model. **Physical Review B**, 63, n. 153103, 15 abr. 2001. 1-4.
- [53]. ANDERSON, E. et al. **LAPACK Users' Guide**. 3^a. ed. [S.l.]: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.
- [54]. BUTCHER, J. C. **Numerical Methods for Ordinary Differential Equations**. [S.l.]: Wiley, 2003.
- [55]. PEIXOTO, A. S. et al. Wavepacket dynamics of coupled particles in aperiodic chains: Weakening of Anderson localization and local field effects. **Physica A**, 395, Fevereiro 2014. 22-30.
- [56]. DIAS, W. S.; LYRA, M. L.; MOURA, F. A. B. F. D. The role of Hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons. **Physics Letters A**, 374, Julho 2010. 4554-4558.
- [57]. POPESCU, B. S.; CROY, A. Emergence of Bloch oscillations in one-dimensional systems. **Physical Review B**, 95, Junho 2017.
- [58]. MEINERT, F. et al. Bloch oscillations in the absence of a lattice. **Science**, 356, Junho 2017.
- [59]. LI, L. et al. Method for direct observation of Bloch oscillations in semiconductors. **Optics Express**, 26, n. 18, Setembro 2018.
- [60]. FELDMANN, J. et al. Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice. **Physical Review B**, 46, Setembro 1992.

- [61]. LEO, K. et al. Observation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice. **Solid State Communications**, 84, n. 10, Dezembro 1992. 943-946.
- [62]. MARDER, M. P. **Condensed Matter Physics**. 2^a. ed. [S.l.]: Wiley, 2015.

ANEXO

Anexo A: Artigo – O papel da interação local e não-local na dinâmica de duas partículas correlacionadas.



Contents lists available at ScienceDirect

Solid State Communications

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

The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk



A.S. Peixoto, W.S. Dias*

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

ARTICLE INFO

Article history:

Received 19 August 2015

Received in revised form

14 April 2016

Accepted 29 April 2016

by C. Lacroix

Available online 4 May 2016

Keywords:

Correlated particles

Two-particles

Bound states

Hubbard model

ABSTRACT

We study the influence of the on-site and nearest-neighbor interactions on the eigenstates and dynamics of two-particles restricted to move in a one-dimensional optical lattice. An effective tight-binding approach with non-local interactions is employed in order to consider the non-perfect screening of the coulomb interaction between two-particles. Numerical and analytical results unveil the emergence of a new sub-band of bound states due to the nearest-neighbor interaction, besides a broadening of the usual sub-band associated with the hubbard-like on-site coupling. Furthermore, we solve the time-dependent schrodinger equation to follow the time evolution of an initially localized two-particles state. While the on-site interaction is responsible for a correlated dynamics in which particles occupy predominantly the same site, nearest-neighbor interactions is shown to be able to induce a quantum walk on which the particles remain predominantly in neighboring sites.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The advancements of techniques in cooling and manipulating ultracold atoms in optical lattices have promoted remarkable progress in condensed-matter physics. For example, one can use a non-interacting Bose–Einstein condensate to study Anderson localization, [1,2] observe persistent Bloch oscillations of weak-interacting bosonic Sr atoms [3] or use an ultracold fermionic atoms to implement the Haldane model and characterize its topological band structure [4]. In particular, the control of the interactions using Feshbach [5,6] resonance technique and the control of kinetic energy via lattice depth in ultracold atoms have provided a route to explore the physics of Hubbard models [7–10]. These advancements in experimental techniques are an important step in the research and understanding of quantum many-body states.

Recently, Bose–Einstein condensate of ^{87}Rb atoms in a cubic 3D optical lattice exemplified the correspondence between the Hubbard model and ultracold atoms in optical lattices [11]. A two-atom bound state was observed that exhibit long lifetimes and arises from the lattice band structure and repulsion between particles. Pairing of particles can be produced in an analogous manner in Fermionic atoms [12] and Bose–Fermi mixtures [13]. In general lines, it is believed that the stability of bound particles could be the basis of an abundance of new quantum many-body

states or phases. For example, the coherence of Cooper-pair tunneling in Josephson-junction systems has been extensively studied due to their great potential in both quantum computation and nanotechnology [14]. In a seminal paper Shepelyansky [15] found that bound states of two interacting particles are responsible by weakening of Anderson localization. This behavior has been seen in other works, both theoretical [16,17] as well as experimental bosonic [18] and fermionic [19] systems. Bound states of two interacting particles are also responsible for inducing the coherent phenomenon of frequency doubling of Bloch oscillations [20,22–24]. Predicted for two interacting particles subjected to an external electric field and restricted to move in a linear chain [20,22,23], its experimental observation was recently reported in ultracold atoms of bosonic ^{87}Rb [24]. An equivalent photonic setup, where two particles in 1D are mapped to a 2D array of waveguide, has been proposed [25] and experimentally achieved in waveguide lattices [26]. Besides, few interacting bosons in a one-dimensional lattice with dc bias displays fractional Bloch periods which are inversely proportional to the number of bosons clustered into a bound state [27]. An experimental setup to create anyons in one-dimensional lattices with fully tuneable exchange statistics is proposed by Keilmann and collaborators [28]. The experiment proposes features such as the full control and tuneability of the particles' exchange statistics. More recent studies displays a scheme for realizing the anyon Hubbard model. The scheme allows for controllable effective interactions for an exact two-body hard-core constraint [29].

In this work, we will show that two interacting electrons allocated in an optical lattice can produce the emergence of a two

* Corresponding author.

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

sub-band of bound states. Described in the framework of the tight-binding Hubbard model hamiltonian wherein there is on-site and nearest-neighbor interactions between particles, we examine the eigenstates and the time dependence of wavepackets. Numerical and analytical results unveil the emergence of a new sub-band of bound states due to the nearest-neighbor interaction, besides a broadening of the usual sub-band associated with the Hubbard-like on-site coupling [30,20]. By following the time evolution of wavepackets, we will show that while the on-site interaction is responsible for a correlated dynamics in which particles occupy predominantly the same site, nearest-neighbor interaction is shown to be able to induce a quantum walk on which the particles remain predominantly in neighboring sites.

2. Model and formalism

In order to describe two-interacting electrons with opposite spins placed in an optical lattice, while there is on-site and nearest-neighbor interactions between them, we consider a tight-binding Hubbard model hamiltonian as

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle lm \rangle} \sum_{\sigma} c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} + U \sum_l \hat{n}_{l,1} \hat{n}_{l,2} + V \sum_{\langle lm \rangle} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{m,\sigma'} + \sum_l \epsilon_l \hat{n}_{l,\sigma}. \quad (1)$$

Here $c_{l,\sigma}^{\dagger}$ and $c_{l,\sigma}$ are the creation and annihilation operators for the particle at site l with spin state σ . $\langle lm \rangle$ denotes nearest-neighbor and $\hat{n}_{l,\sigma} = c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma}$. J is the nearest-neighbor hopping, ϵ_l the on-site energies, U and V the on-site and the nearest-neighbor interaction strength respectively. The screened Coulomb potential contains an exponential damping factor associated with the inverse screening length [21]. As the nearest-neighbor interaction V is added in order to mimic the non-perfect screening of particles, we assume that the screening length is very small and we will focus on values $V \leq U/3$.

The central object of interest is to identify the role of the non-local on-site Hubbard interaction between particles on the eigenstates and the dynamic behavior of wavepackets. Therefore, initially we will apply a numerical diagonalization procedure of the Hamiltonian in order to obtain all eigenvectors $|\Phi\rangle = \sum_{l,m} \phi(l,m) |l, \sigma; m, \sigma'\rangle$ and eigenvalues E . On the other hand, in order to follow the time evolution of wavepackets, we solve the time-dependent Schrödinger equation by expanding the wavefunction in Wannier representation

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{l,m} \phi_{l,m}(t) |l, \sigma; m, \sigma'\rangle, \quad (2)$$

where the ket $|l, \sigma; m, \sigma'\rangle$ represents a state with one particle with spin σ at site l , and the other particle with spin σ' at site m . In this model we consider the particle as being distinguishable by their spin state since the Hamiltonian does not involve spin exchange interactions. Thus, the time evolution of the wavefunction in the Wannier representation becomes

$$J[\phi_{l-1,m}(t) + \phi_{l+1,m}(t) + \phi_{l,m-1}(t) + \phi_{l,m+1}(t)] + V(\delta_{l+1,m} + \delta_{l-1,m})\phi_{l,m}(t) + \delta_{l,m}U\phi_{l,m}(t) = i\frac{d\phi_{l,m}(t)}{dt}, \quad (3)$$

where we used the on-site energies ϵ_l as the reference energy ($\epsilon_l = 0$) without any loss of generality, besides using units of $\hbar = J = 1$.

The above set of equations was solved numerically using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution

operator $\Gamma(\Delta t)$,

$$\Gamma(\Delta t) = e^{-iH\Delta t} = 1 + \sum_{n=1}^{n_f} \frac{(-iH\Delta t)^n}{n!} \quad (4)$$

where H is the Hamiltonian. The wavefunction at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = \Gamma(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$, used recursively to obtain the wavefunction at time t . The following results were taken by using $\Delta t = 0.07$ and the sum was truncated at $n_f = 20$. This cutoff was sufficient to keep the wavefunction norm conservation along the entire time interval considered. We followed the time evolution of an initially Gaussian wavepacket with width ρ

$$\langle l, \sigma; m, \sigma' | \Phi(t=0) \rangle = \frac{1}{A(\rho)} \exp\left[-\frac{(l-l_0)^2}{4\rho^2}\right] \times \exp\left[-\frac{(m-m_0)^2}{4\rho^2}\right], \quad (5)$$

where the initial positions (l_0, m_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 eigenstates and wavepacket time-evolution, as will be detailed below.

3. Results

3.1. Eigenstates: numerical and analytical analysis

We firstly examine the two-particles eigenstates by applying a numerical diagonalization procedure of the complete Hamiltonian to an open chain with $N=200$ sites. In Fig. 1 we show results for the normalized density of states defined as

$$DOS(E) = \frac{1}{N} \sum_l \delta(E - E_l), \quad (6)$$

versus energy E for $U=4, 8$ and 12 , without nearest-neighbor interaction $V=0$ (see brown filled curve) and with nearest-neighbor interaction $V=U/3$ (see unfilled curve). Insets show amplifications of the density of states, highlighting different aspects between $V=0$ and $V \neq 0$. For $U=4$ the DOS exhibits the

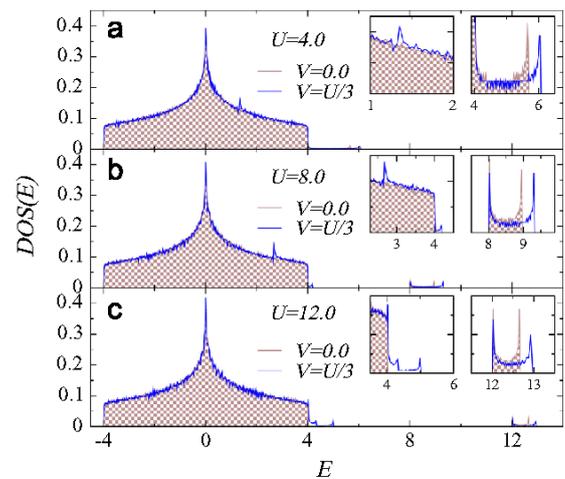


Fig. 1. Normalized density of states (DOS) versus energy (E) for $U=4, 8$ and 12 , computed for open crystalline chains ($\epsilon_l = 0$ for all n) with $N=200$ sites. The presence of the nearest-neighbor interaction (here $V=U/3$) gives rise to a new sub-band of bound states, besides increasing the width of the “on-site” sub-band (see unfilled curve). The insets show amplifications of the density of states around the sub-bands.

emergence of a sub-band of bound states, consistent with the previous literature [30,20]. However, the existence of a non-local particle–particle interaction (here $V=U/3$) promotes a broadening of this sub-band (see inset), estimated to cover the energy range $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$ for $V=0$ [30,20]. Moreover, we observe the emergence of a peak structure in the main band, suggesting the emergence of a new sub-band. This assumption becomes evident as we increase the particle–particle interaction. For $U=12$ the emergence of a new sub-band is more evident, since it becomes detached from the main band.

The above results led us to an analytical investigation. Following the Hamiltonian (Eq. (1)), we can write the time independent Schrödinger equation as

$$J[\phi(l-1, m) + \phi(l+1, m) + \phi(l, m-1) + \phi(l, m+1)] + V(\delta_{l+1, m} + \delta_{l-1, m})\phi(l, m) + \delta_{l, m}U\phi(l, m) = E\phi(l, m), \quad (7)$$

where $\phi(l, m)$ is the probability amplitude of having one particle in site l and another particle in site m . In order to obtain the stationary solution, we assume a transformation to center-of-mass coordinates $\phi(l, m) = e^{ik(l+m)}\chi(l-m)$. Thus we can rewrite the above equation as

$$J[e^{-ika}\chi(l-m-1) + e^{ika}\chi(l-m+1) + e^{ika}\chi(l-m-1) + e^{-ika}\chi(l-m+1)] + V(\delta_{l-1, m} + \delta_{l+1, m}) + U\delta_{l, m}\chi(l-m) = E\chi(l-m) \quad (8)$$

Defining $r=l-m$ as the distance between the two particles, we obtain the time independent Schrödinger equation as

$$2J \cos(ka)[\chi(r-1) + \chi(r+1)] + V(\delta_{r-1} + \delta_{r+1})\chi(r) + U\delta_{r,0}\chi(r) = E\chi(r). \quad (9)$$

In the absence of interaction, i.e. $V=0$ and $U=0$, we can assume $\chi(r) = e^{irza}$. Thus, we obtain the following as a result of Eq. (9):

$$E = 4J \cos(ka) \cos(za). \quad (10)$$

Therefore, we observe the existence of a band of pure states covering the range

$$-4J \leq E \leq 4J. \quad (11)$$

This result agrees with the literature [30,20] and with Fig. 1 too, in which we can see a main band wherein the DOS is exactly the same obtained for the tight-binding 2D Anderson Hamiltonian for one particle in a square lattice geometry.

In order to obtain more information on the sub-bands shown in Fig. 1, we assume without any loss of generality, the existence of eigenstates with odd and even parity. For the case of even parity eigenvectors, the wavefunction must respect the relation $\chi(r) = \chi(-r)$. We take into consideration Eq. (9) for the cases $r=0, 1$. In addition, we assume the existence of a constant λ so that $\chi(r+1) = \lambda\chi(r)$. In order to keep the finite amplitudes while r becomes large, one must have $|\lambda| \leq 1$. Thus, after solving the equations we get

$$E = V \pm \sqrt{(U-V)^2 + 16J^2 \cos^2(ka)}, \quad (12)$$

where \pm sign should have the same as the sign of U . Since we are interested in the case of positive U (repulsive interaction), this result shows the existence of a sub-band covering the range

$$U \leq E \leq V + \sqrt{(U-V)^2 + 16J^2}. \quad (13)$$

This analysis is in full agreement with the results obtained in Fig. 1. For example, in considering $U=12$ and $V=4$ (as well the data displayed in Fig. Fig. 1c), we get eigenstates positioned

between $U=12$ and $U \approx 12.94$. We emphasize that in the absence of V interaction the range of eigenstates cover the energy $U \leq E \leq \sqrt{U^2 + 16J^2}$, agreeing with the literature result for the case of pure on-site interaction [30,20]. Thus, we see how the nearest-neighbor interaction broadens this sub-band.

Now, considering odd parity eigenvectors, the wavefunction must respect the relation $\chi(r) = -\chi(-r)$. Since $r=0$ gives us the trivial solution of Eq. (9), we analyze the equation where $r=1, 2$. Again we assume a constant λ so that $\chi(r+1) = \lambda\chi(r)$. After these considerations, we obtain as a result

$$E = V + \frac{4J^2 \cos^2(ka)}{V}. \quad (14)$$

Therefore, the new sub-band comprises the range

$$V \leq E \leq V + \frac{4J^2}{V}. \quad (15)$$

This result is in excellent agreement with the numerical data in Fig. 1.

In order to better characterize the nature of the eigenstates, we compute the two-particles correlation function, written as

$$\zeta(E) = \langle n_1 n_2 \rangle - \langle n_1 \rangle \langle n_2 \rangle, \quad (16)$$

where $\langle n_1 \rangle$ and $\langle n_2 \rangle$ are the particle average positions given by $\langle n_i \rangle = \sum_{n_1, n_2} (n_i) |\phi(n_1, n_2)|^2$. In Fig. 2, we report the analysis of the correlation function (ζ) versus energy (E) for (a) $U=4$ and $V=0.0$; (b) $U=4$ and $V=U/3$; (c) $U=12$ and $V=0.0$; (d) $U=12$ and $V=U/3$. Results denote that the states within the sub-bands exhibit strong particle–particle coupling with magnitudes consistent with those observed in interacting particles systems with only on-site interaction ($V=0$), typical of bound states. Even while the sub-band is superposed with the main band, the strong correlation is still noticed for some states corresponding to those predicted for this new sub-band.

The previous analysis has shown the broadening of the standard bound states sub-band and the emergence of another sub-

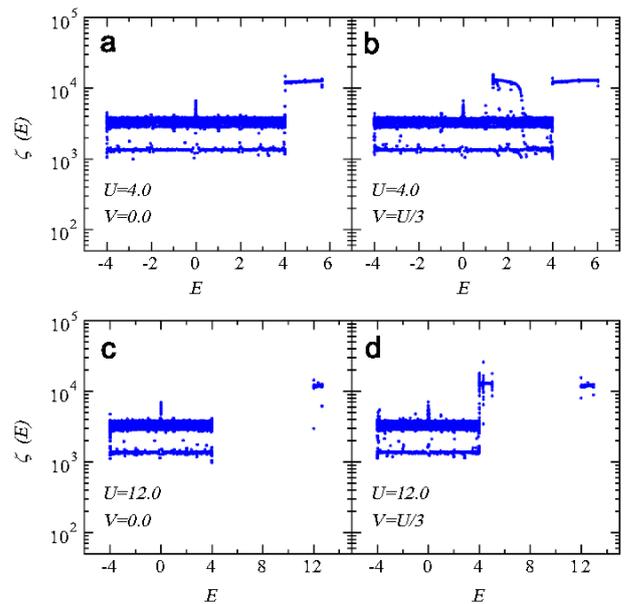


Fig. 2. Correlation function (ζ) versus energy (E) for (a) $U=4$ and $V=0.0$; (b) $U=4$ and $V=U/3$; (c) $U=12$ and $V=0.0$; (d) $U=12$ and $V=U/3$; computed for open crystalline chains ($e_n=0$ for all n) with $N=200$ sites. The presence of the nearest-neighbor interaction ($V=U/3$) (fig. b and d) induces the formation of a new sub-band of bound states, with the eigenstates in both sub-bands exhibiting strong particle–particle correlations.

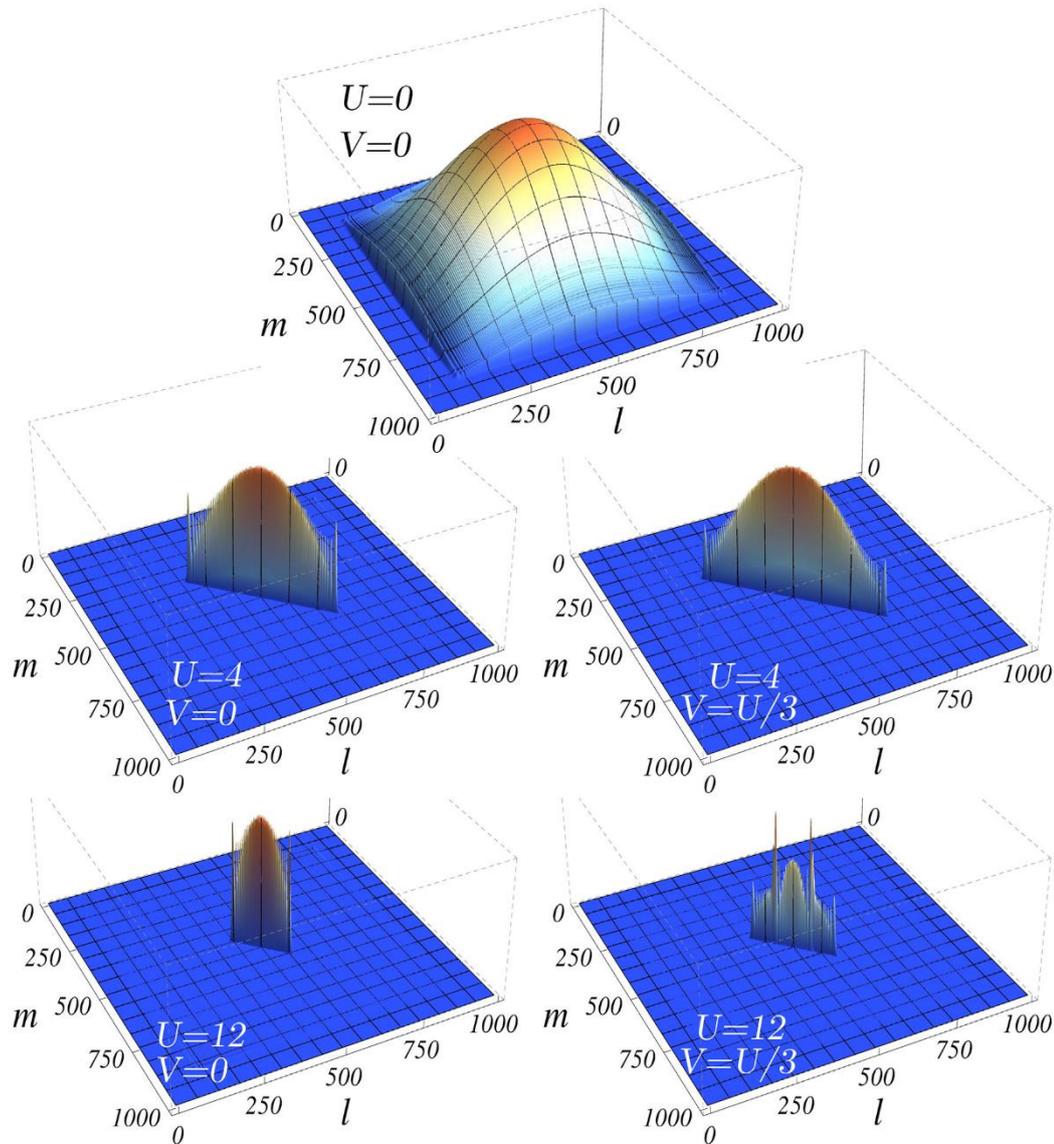


Fig. 3. Two-particle wave-packet after long evolution time. We used $N=1000$, $d_0=0$, on-site interaction U , the absence of nearest-neighbor interaction $V=0$ (plots on the left) and for nearest-neighbor $V=U/3$ (plots on the right). In the absence of particle–particle coupling, both electrons spread on an uncorrelated fashion this filling the $l \times m$ plane (see top panel). For $U > 0$, the particles become correlated due to the emergence of bound states and, thus, the wavepacket concentrates along the diagonal $l=m$. The non-local interaction promotes a stronger coupling between them along a larger number of sites.

band, both showing strong particle–particle correlations. Thus, due to the expected relevant role played by bound states on the wavefunction dynamics [15–20,22,23,25–27], we focus hereafter on the time-evolution of two-particle wavepackets.

3.2. Time-dependent Schrödinger equation analysis

In order to explore how the non-local interaction affects the two-electron dynamic behavior, we followed the time-evolution of an initially Gaussian wavepacket with width $\rho=1$ and analyzed the two-particle correlations in position space. Calculations were performed using $N=1000$, $d_0=0$ and systems with finite values of the on-site interaction U , both in the absence and presence of the non-local interaction V . The dispersion of the wave-packet displays a long-lived behavior after a rapid transient [22,23]. Thus, we followed the wave packet while its magnitude at the chain borders

is negligible ($\sum |\phi_{lm}(t)|_{border}^2 < 10^{-30}$), up to $t \approx 300$ time units for this chain size.

In Fig. 3, we show the two-particle wave-packet in the $l \times m$ plane after a long time evolution, here $t = 200$ time units. The figures are arranged so that the plots on the left shows the absence of nearest-neighbor interaction $V=0$ while plots on the right have nearest-neighbor interaction $V=U/3$. For $U=0$ and $V=0$ (see top panel) both particles spread independently, with the two-particles wave-packet filling roughly isotropically the $l \times m$ plane. For $U > 0$ the central structure reveals a bunching behavior, i.e., the particles become correlated and the wavepacket concentrates around the $l=m$ region. Consistent with previous studies (see Ref. [22]), as we increase U a portion of the wavepacket become more correlated. However, the non-local interaction makes the electrons to develop a correlated dynamics along a larger segment of the chain. For $U=4$, we stress that the on-site sub-band is partially disconnected

from the main band, while the nearest-neighbor sub-band is fully superposed with the main band. In this case, the nearest-neighbor interaction has magnitude approximately equal to one-third of the main bandwidth. When the bound state sub-band is superposed with the main band, many states behave like quasi-bound states. Thus, the observed behavior is associated to the fact that the non-local interaction promotes a broadening of the on-site sub-band and the emergence of the nearest-neighbor bound states sub-band. For $U=12$, when the two sub-bands are disconnected from the main band, it is observed that the non-local interaction promotes a stronger coupling between particles. The width of the central structure is noticeably larger in the presence of the non-local interactions, as a consequence of the emergence of nearest-neighbor bound states. On the other hand, the change of its structure for $V \neq 0$ reveals modification of correlations promoted by non-local interaction.

In order to better understand the role played by the nearest-neighbor interaction on the wavepacket dynamics we computed the long-time average of double occupancy probability, defined as

$$\langle DOP(t) \rangle = \left\langle \sum_m |\phi_{m,m}(t)|^2 \right\rangle; \quad (17)$$

nearest-neighbor occupancy probability, defined as

$$\langle NOP(t) \rangle = \left\langle \sum_{l=m+1}^{m+l} |\phi_{l,m}(t)|^2 \right\rangle; \quad (18)$$

and next-nearest-neighbor occupancy probability, defined as

$$\langle NNOP(t) \rangle = \left\langle \sum_{l=m+2}^{m+l} |\phi_{l,m}(t)|^2 \right\rangle. \quad (19)$$

The following results were obtained from chains with $N=1000$ sites, wavepacket width $\rho=1$ and $d_0=0$. Thus, we followed the wave packet while its magnitude at the chain borders is negligible ($\sum |\phi_{l,m}(t)|^2_{border} < 10^{-30}$). Given that the dispersion of the wavepacket displays a long-lived behavior after a rapid transient [22,23], we ignore the initial times in order to calculate the long-time average.

In Fig. 4 we show results for $\langle DOP(t) \rangle$ as a function of the Coulomb interaction U , whereas $V=0, U/3, U/4, U/5$. Whenever $U=0$, the wavepackets of the two particles spread independently, corroborating the results presented above. On the other hand, as

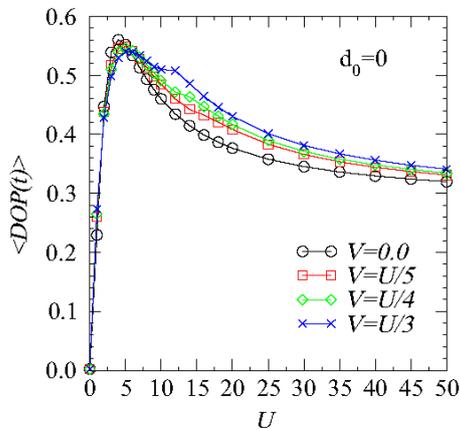


Fig. 4. Time average of the double occupancy probability versus U for nearest-neighbor interaction $V=0, U/3, U/4, U/5$. Although the interaction favors the coherent hopping associated with bound states, its repulsive character decreases the double occupancy probability coming from the superposition with unbound states. The broadening of the on-site bound states sub-band with increasing values of V promotes a slower decay of the $\langle DOP(t) \rangle$ with respect to U .

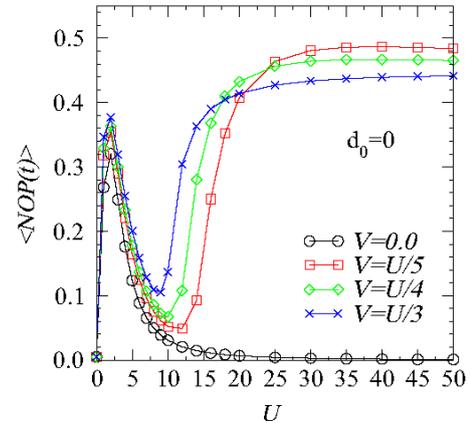


Fig. 5. Time average of the nearest-neighbor occupancy probability versus U for nearest-neighbor interaction $V=0, U/3, U/4, U/5$. While the nearest-neighbor sub-band is superposed with the main band, the behavior is quite similar to that observed in the absence of non-local interaction. The splitting of the nearest-neighbor sub-band and the main band favors the occupation of states in nearest-neighbor for strong interaction. The disposition of curves $V \neq 0$ for strong interactions exposes the repulsive character of particle–particle interaction.

the interaction is turned on, the emergence of bound states correlates the two-particles dynamics. The non-monotonic behavior of $\langle DOP(t) \rangle$ as a function of the Coulomb interaction U is due to contributions coming from bound and unbound states in the initial state. While the interaction favors the coherent hopping associated with bound states, its repulsive character decreases the double occupancy probability coming from the superposition with unbound states [20]. This competition leads to an optimal coupling to obtain a correlated dynamics of the two-particles system, with the coupled particles effectively behaving as a single particle with charge $2e$. The maximum value of $\langle DOP(t) \rangle$ takes place for the value of U corresponding to the detachment of the usual bound states band from the main band. The presence of non-local interaction promotes the broadening of the on-site bound states sub-band (see eq. (13)), which results in the slower decay of $\langle DOP(t) \rangle$ with respect to U .

In Fig. 5, we show results for the nearest-neighbor occupancy probability $\langle NOP(t) \rangle$ as a function of Coulomb interaction U , for $V=0, U/3, U/4, U/5$ and $d_0=0$. For $V=0$ the behavior described is consistent with results discussed previously. The favoring of the on-site bound states by the coupling between particles promotes the coherent hopping through the lattice. As U grows, the on-site bound states correlates only wavefunction components with the two particles located in the same site, which leads to $\langle NOP(t) \rangle = 0$. In the presence of non-local interaction, while the nearest-neighbor sub-band is superposed with the main band, the behavior is quite similar to that observed in the absence of non-local interaction. The small difference is due to the broadening of the on-site sub-band (see Eq. (13)). However, the non-local interaction promotes a different behavior for strong interactions. The detachment of the nearest-neighbor sub-band from the main band favors the occupation of states in nearest-neighbor. The repulsive character of particle–particle interaction is noted by observing the disposition of curves $V \neq 0$ for strong interaction, with NOP being smaller for larger values of V . The fact that the nearest-neighbor occupancy probability remains finite over long runs signals the predominance of the correlated quantum hopping process of particle occupying neighboring sites.

In Fig. 6, we show the next-nearest-neighbor occupancy probability $\langle NNOP(t) \rangle$ as a function of Coulomb interaction U for nearest-neighbor interaction $V=0, U/3, U/4, U/5$. The behavior observed is clearly associated to the splitting of the bound state

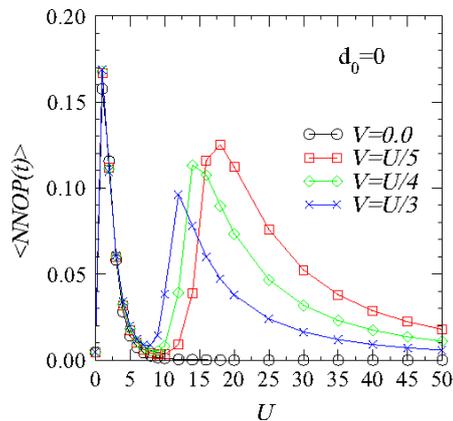


Fig. 6. Time average of next-nearest-neighbor occupancy probability versus U for nearest-neighbor interaction $V = 0, U/3, U/4, U/5$. The observed behavior is clearly associated to the splitting of the bound state bands from the main band. The first peak is related to on-site sub-band while the second is related to nearest-neighbor sub-band. The next-nearest-neighbor occupation probability decrease for strong U unveils the coherent nature of the quantum walk of two particle located on neighboring sites.

bands from the main band. The first peak is related to the on-site sub-band while the second one is related to the nearest-neighbor sub-band. The next-nearest-neighbor occupation probability decreases for strong U signals the predominance of coherent quantum walk on neighboring sites.

4. Summary and conclusions

In summary, we studied a system of two interacting electrons on a 1D optical lattice. In order to emulate remnants of the Coulomb interaction owing to the non-perfect screening, we considered both on-site and nearest-neighbor interaction between particles. By numerical and analytical analysis, the emergence of a new sub-band of bound states due to the nearest-neighbor interaction was shown, besides a broadening of the usual sub-band associated with the on-site interaction. By following the time evolution of an initially localized two-particle wavepacket, we showed that these bound states can promote a correlated quantum walk of particles. While the on-site interaction is responsible to induce a correlated dynamics in which electrons occupy predominantly the same site, nearest-neighbor interaction shows itself capable of inducing a co-walking where the particles are kept in neighboring sites. The coherent hopping between particles displays a non-monotonic behavior as a function of the on-site U interaction. Analyzing the location of the bound state sub-bands with respect to the main band, we were able to unveil the physical mechanism underlying the observed trends of the coherent two-particle quantum walk. To conclude, we stress that recent experimental advances on ultracold

atoms and photonic engineering make us believe that the proposed scheme can be implemented (see Section 1). Besides, we believe the present results will stimulate the development of new studies associated with correlated quantum walks. For example, it is well known that in the absence of nearest-neighbor interaction, the on-site bound states is responsible for a coherent hopping between particles, describing relevant characteristics related to weakening of Anderson localization [15–19] and Bloch oscillations of interacting particles [20,22,23,25–27]. As reported here results indicate that nearest-neighbor interaction has a significant impact on the two-particles quantum dynamics. It would be much valuable to have additional efforts aiming to evaluate its influence on these related physical phenomena.

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] Juliette Billy, et al, *Nature* 453 (2008) 891.
- [2] Giacomo Roati, et al, *Nature* 453 (2008) 895.
- [3] G. Ferrari, N. Poli, F. Sorrentino, G.M. Tino, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 060402.
- [4] Gregor Jotzu, et al, *Nature* 515 (2014) 237.
- [5] M. Fattori, et al, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 080405.
- [6] S.E. Pollack, et al, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 090402.
- [7] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, Wilhelm Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* 80 (2008) 885.
- [8] Tilman Esslinger, *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* 1 (2010) 129.
- [9] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, Sylvain Nascimbène, *Nature* 8 (2012) 267.
- [10] Waseem S. Bakr, et al, *Nature* 462 (2009) 74.
- [11] K. Winkler, et al, *Nature* 441 (2006) 853.
- [12] W. Hofstetter, et al, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 220407.
- [13] M. Lewenstein, L. Santos, M.A. Baranov, H. Fehrmann, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 050401.
- [14] Yuriy Makhlin, Gerd Schön, Alexander Shnirman, *Rev. Mod. Phys.* 73 (2001) 357.
- [15] D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 2607.
- [16] Changhyoung Lee, Amit Rai, Changsuk Noh, Dimitris G. Angelakis, *Phys. Rev. A* 89 (2014) 023823.
- [17] W.S. Dias, M.L. Lyra, *Physica A* 411 (2014) 35.
- [18] B. Deissler, et al, *Nat. Phys.* 6 (2010) 354.
- [19] Michael Schreiber, et al, *Science* 349 (2015) 842.
- [20] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 155124.
- [21] D. Bohm, *Phys. Rev.* 92 (1953) 609.
- [22] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 045116.
- [23] W.S. Dias, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Phys. Lett. A* 374 (2010) 4554.
- [24] Philipp M. Preiss, et al, *Science* 347 (2015) 1229.
- [25] Stefano Longhi, *Opt. Lett.* 36 (2011) 3248.
- [26] G. Corrielli, et al, *Nat. Commun.* 4 (2013) 1555.
- [27] R. Khomeriki, D.O. Krimer, M. Haque, S. Flach, *Phys. Rev. A* 81 (2010) 065601.
- [28] T. Keilmann, S. Lanzmich, I. McCulloch, M. Roncaglia, *Nat. Commun.* 2 (2011) 361.
- [29] S. Greschner, L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* 115 (2015) 053002.
- [30] J.F. Weisz, F. Claro, *J. Phys.: Condens. Matter* 15 (2003) 3213.