

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

TESE DE DOUTORADO

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM SISTEMAS COM
INTERAÇÃO ELÉTRON-ELÉTRON, ELÉTRON-REDE E
MÁGNON-REDE

MARCONI SILVA SANTOS JUNIOR

Maceió

2024

MARCONI SILVA SANTOS JUNIOR

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM SISTEMAS COM
INTERAÇÃO ELÉTRON-ELÉTRON, ELÉTRON-REDE E
MÁGNON-REDE

Tese apresentada no Instituto de Física da
Universidade Federal de Alagoas como parte
dos créditos para a obtenção do título de
Doutor em Física.

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

Maceió

2024

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária: Helena Cristina Pimentel do Vale CRB4 - 661

- S237p Santos Junior, Marconi Silva.
Propriedades de transporte em sistemas com interação elétron-elétron,
elétron-rede e mágnon-rede / Marconi Silva Santos Junior. – 2024.
125 f. : il.
- Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Tese doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas, Instituto de
Física. Maceió, 2024.
- Bibliografia: f. 98-104.
Apêndices: f. 118-125.
Inclui anexos.
1. Elétron-elétron. 2. Elétron-rede. 3. No-linearidade. 4. Mágnon-rede.
5. Estados quânticos. I. Título.

CDU: 538.935



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

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
TESE DE DOUTORADO

***“Propriedades de transporte em sistemas com interação elétron-
elétron, elétron-rede e mágnon-rede”***

por

Marconi Silva Santos Júnior

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, como presidente da banca examinadora e orientador, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Vinícius Manzoni Vieira, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Iram Marcelo Gleria, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; André Maurício Conceição de Souza, da Universidade Federal de Sergipe; e Adauto José Ferreira de Souza, da Universidade Federal Rural de Pernambuco; consideram o **candidato aprovado com conceito “A”**.

Maceió, 05 de abril de 2024.

Documento assinado digitalmente
gov.br FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA
Data: 05/04/2024 16:32:42-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Documento assinado digitalmente
gov.br VINICIUS MANZONI VIEIRA
Data: 19/04/2024 07:22:07-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Vinícius Manzoni Vieira

Documento assinado digitalmente
gov.br IRAM MARCELO GLERIA
Data: 06/04/2024 13:18:55-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Iram Marcelo Gleria

Documento assinado digitalmente
gov.br ANDRÉ MAURÍCIO CONCEIÇÃO DE SOUZA
Data: 06/04/2024 10:32:43-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza

Documento assinado digitalmente
gov.br ADAUTO JOSÉ FERREIRA DE SOUZA
Data: 05/04/2024 17:01:29-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza

*Este trabalho é dedicado às crianças adultas que,
quando pequenas, sonharam em se tornar cientistas.*

Agradecimentos

Primeiramente à Deus, que me permitiu alcançar mais essa conquista em minha vida. Aos meus pais, Marconi Silva Santos com todo o meu amor, por me apoiar em todas as minhas escolhas e Rosa Nilce Costa Silva Santos (*in memoriam*) que certamente estaria orgulhosa do filho. Aos meus Irmãos Zayne e Gustavo, pelo amparo nos momentos difíceis e a minha madrastra Socorro, pelo incentivo e confiança. Aos meus avós Terezinha Barreto (Dona Tê - *in memoriam*) e José Martins (Seu Zói) pelo carinho. Aos meus tios(as), Marcela, Márcia, Múcio e Marcos pelo apoio incondicional durante toda essa jornada.

Agradeço imensamente ao meu orientador Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura pela sua dedicação nas orientações, presteza nos ensinamentos, paciência e apoio em cada etapa deste trabalho.

Aos meus irmãos de batalha Júnior Lima, Max Melo e Raline Araújo. A todos que embora não diretamente citados, mas que de alguma forma colaboraram para a concretização deste trabalho. Agradeço também a CAPES pelo suporte financeiro.

*“Ninguém baterá tão forte quanto a vida. Porém, não se trata de quão forte pode bater,
se trata de quão forte pode ser atingido e continuar seguindo em frente.
É assim que a vitória é conquistada.
(Rocky Balboa)*

Resumo

Neste trabalho, foi estudado a dinâmica eletrônica sob a influência da interação Coulombiana e o efeito da interação com a rede usando o modelo SSH, como também o estudo do par mágnon-rede e a transferência de estados quânticos com desordem correlacionada. No contexto da interação de Coulomb, o termo elétron-elétron em uma rede unidimensional cria uma sub-banda de estados ligados, desacoplando-se inicialmente da banda principal de estados para $U = 8$, também observado para $U = 12$. O Hamiltoniano permite considerar termos de interação elétron-elétron locais e também não locais. Pode-se observar o surgimento de uma nova sub-banda devido à interação entre os primeiros vizinhos e o alargamento desta sub-banda devido à interação local entre as partículas. A dinâmica do sistema sob a ação de um campo elétrico externo mostra que a interação entre as partículas promove um movimento coerente, resultando em modos de oscilação com frequência dobrada. A propagação eletrônica sob o efeito da interação elétron-rede foi investigada no formalismo de não-linearidade cúbica. Introduziu-se o acoplamento entre o elétron e a rede através da distribuição de *hopping*. Foram resolvidas as equações acopladas para o sistema elétron-rede e calculada a posição eletrônica em função do tempo. Foi feita uma investigação detalhada da dinâmica do elétron e da rede para uma ampla gama de intensidades de acoplamento elétron-rede. Os resultados demonstram que dependendo da condição inicial considerada e da intensidade da interação elétron-rede, é possível obter a formação do par elétron-rede. Os resultados também revelam que, dependendo da velocidade inicial da rede e do grau do termo elétron-rede, é observado uma repulsão entre a deformação da rede e o elétron. No trabalho envolvendo a interação mágnon-rede em uma cadeia de Morse não linear, onde o acoplamento entre o mágnon e a rede foi feito através do termo de *exchange* no Hamiltoniano de Heisenberg, os resultados indicam que a formação do par mágnon-rede acontece para valores específicos de interação e que dependem das condições iniciais. Também foi observado que com o aumento da diferença de tempo entre a propagação do mágnon e a rede, os valores necessários para promover o acoplamento diminui. Por fim, no último trabalho foi explorado a transferência de estados quânticos sob a influência de campos magnéticos desordenados e com acoplamentos de troca com desordem correlacionada de longo alcance. O mágnon a ser transmitido está em uma rede no estado fundamental ferromagnético. Para campo diferente de zero, a localização de Anderson é induzida no canal, mas uma transmissão melhor que a clássica ainda é possível para campo com intensidade moderada.

Palavras-chave: Elétron-elétron; elétron-rede; não-linearidade; mágnon-rede; estados quânticos.

Abstract

In this work, the electronic dynamics under the influence of Coulombic interaction and the effect of interaction with the lattice using the SSH model were studied. Additionally, the magnon-lattice pair and the transfer of quantum states with correlated disorder were investigated. In the context of Coulomb interaction, the electron-electron term in a one-dimensional lattice creates a sub-band of bound states, initially decoupling from the main band of states for $U = 8$, also observed for $U = 12$. The Hamiltonian allows for the consideration of local and non-local electron-electron interaction terms. The emergence of a new sub-band due to interaction between nearest neighbors and the broadening of this sub-band due to local interaction between particles can be observed. The system's dynamics under the influence of an external electric field show that particle interaction promotes coherent motion, resulting in oscillation modes with doubled frequency. Electronic propagation under the effect of electron-lattice interaction was investigated in the cubic nonlinearity formalism. The coupling between the electron and the lattice was introduced through the hopping distribution. The coupled equations for the electron-lattice system were solved, and the electronic position as a function of time was calculated. A detailed investigation of the electron and lattice dynamics was conducted for a wide range of electron-lattice coupling intensities. The results demonstrate that, depending on the initial condition and the intensity of the electron-lattice interaction, the formation of the electron-lattice pair is possible. The results also reveal that, depending on the initial velocity of the lattice and the degree of the electron-lattice term, repulsion between lattice deformation and the electron is observed. In the study involving magnon-lattice interaction in a nonlinear Morse chain, coupling between the magnon and the lattice was achieved through the exchange term in the Heisenberg Hamiltonian. The results indicate that the formation of the magnon-lattice pair occurs for specific interaction values dependent on initial conditions. It was also observed that with an increase in the time difference between magnon propagation and the lattice, the values required to promote coupling decrease. Lastly, in the final study, the transfer of quantum states was explored under the influence of disordered magnetic fields and exchange couplings with long-range correlated disorder. The transmitted magnon is in a lattice in the ferromagnetic ground state. For a non-zero field, Anderson localization is induced in the channel, but better-than-classical transmission is still possible for moderate field intensity.

Keywords: Electron-electron; electron-lattice; nonlinear; magnon-lattice; quantum states.

Lista de ilustrações

Figura 1.	Rede unidimensional com potencial periódico.	20
Figura 2.	Função de onda de Bloch.	21
Figura 3.	(a) Átomos desacoplados. (b) Átomos acoplados através da energia de <i>hopping</i>	22
Figura 4.	Banda de energia para um modelo <i>tight-binding</i> com um orbital por sítio. A energia é plotada em função do vetor de onda na primeira zona de Brillouin.	23
Figura 5.	(a) Potencial Periódico; (b) Potencial Aleatório.	25
Figura 6.	Comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala.	28
Figura 7.	Números gerados pela Eq.(1.32) com parâmetros de correlação dados por $\alpha = 0, 2$ e 4	30
Figura 8.	Ilustração do modelo de Hubbard estendido. Os elétrons se movem através do <i>hopping</i> T entre os primeiros vizinhos, e interagem entre si através da interação local U e não local V	31
Figura 9.	Dinâmica de um elétron em uma banda.	33
Figura 10.	a) Esboço do experimento de Stern-Gerlach; b) Resultado experimental que Stern e Gerlach esperavam obter e o resultado obtido. A teoria clássica verificava que o feixe deveria ser espalhado verticalmente de forma contínua.	38
Figura 11.	Representação da esfera de Bloch de um <i>qubit</i>	43
Figura 12.	(a) Esquemática para uma rede de <i>spins</i> unidimensional em um campo magnético externo; (b) Canal arbitrário em uma rede com N <i>spins</i> , onde os vértices simbolizam os <i>spins</i> e as arestas representam as interações entre os <i>spins</i> interagentes.	45
Figura 13.	Densidade de estados em função da energia para (a) $U = 6$ e $D_U = 1$; (b) $U = 12$ e $D_U = 0.5$; (c) $U = 18$ e $D_U = 0.25$. Para $U > 0$ aparece uma sub-banda de estados ligados. Com o aumento dos valores de U , mais sub-bandas surgem.	59
Figura 14.	PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 0.25$ e $F=0.5$. A PDO mostra uma probabilidade máxima em torno de $U = 15$ tendo um leve decaimento para valores maiores de U . A PO1V tem um decaimento pra os valores iniciais de U , mas a partir de $U = 10$ assume valores maiores a medida que U aumenta. A PO2V toma sempre valores baixos se comparados com a PO1V.	59

Figura 15.	PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 0.5$ e $F=0.5$. Para esse caso, a probabilidade máxima da PDO é em torno de $U = 10$ com um decaimento mais acentuado. A PO1V assume valores cada vez maiores a partir de $U = 10$. Por fim, a PO2V continua tomando valores baixos.	60
Figura 16.	PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 1$ e $F=0.5$. O ponto máximo da PDO em relação a U continua diminuindo. E para PO1V e PO2V a tendência é a mesma dos resultados observados nas Figs. 14 e 15, ou seja, a PO1V assumindo valores maiores com o aumento de U e a PO2V tomando valores baixos.	61
Figura 17.	PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 2$ e $F=0.5$. A tendência da diminuição do ponto máximo da PDO em relação a U é preservada. Com a análise das PO1V e PO2V é possível concluir que a dinâmica de primeiros vizinhos é favorecida.	61
Figura 18.	Comportamento de U em função de D_U para valores de frequência dobrada. Para valores de U e D_U acima da curva, é possível obter o dobramento da frequência das oscilações de Bloch. Para valores abaixo da curva, o dobramento da frequência não é observado.	62
Figura 19.	Posição média $x(t)$ de dois elétrons em uma rede com $N = 100$ sítios na presença de um campo elétrico com intensidade de $F = 0.5$. Primeiro quadro: $D_U = 1$ e $U = 6$; Segundo quadro: $D_U = 0.5$ e $U = 12$; Terceiro quadro: $D_U = 0.25$ e $U = 18$. No lado direito é mostrado a transformada de Fourier $x(\omega)$, onde é observado uma frequência dominante em $\omega = 2F$	62
Figura 20.	Velocidade do elétron (V_e) e da rede (V_L) versus o acoplamento elétron-rede (α) para a) $v_0 = 0.5$, b) $v_0 = 1$ e c) $v_0 = 1.5$. As respectivas curvas das velocidades foram obtidas fazendo um ajuste linear nas curvas de $n_e \times t$ (e $n_L \times t$) para um tempo máximo de 10^4 unidades de tempo.	70
Figura 21.	Velocidade do elétron (V_e) e da rede (V_L) versus o acoplamento elétron-rede (α) para a) $v_0 = -0.5$, b) $v_0 = -1$ e c) $v_0 = -1.5$. Resultados para V_e e V_L sob condições iniciais em que a v_0 é negativa.	71
Figura 22.	Distância normalizada entre o elétron e a deformação da rede versus a interação elétron-rede (α) para a) $v_0 = 0.5$, b) $v_0 = 1$ e c) $v_0 = 1.5$	72
Figura 23.	Distância normalizada entre o elétron e a deformação da rede versus a interação elétron-rede (α) para a) $v_0 = -0.5$, b) $v_0 = -1$ e c) $v_0 = -1.5$	73
Figura 24.	O <i>hopping</i> $T_{n+1,n}$ versus t e n para $\alpha = 5$ e $\alpha = 25$. O <i>hopping</i> tem comportamento diferente se considerado diferentes intensidades para o acoplamento elétron-rede.	74
Figura 25.	Fração da função de onda presa pela deformação da rede solitônica versus a interação elétron-rede (α) para a) $v_0 = 0.5$, b) $v_0 = 1$ e c) $v_0 = 1.5$	75

Figura 26.	Dinâmica elétron-sóliton para: (a) ausência de acoplamento elétron-rede ($\alpha = 0$); (b) presença de acoplamento elétron-rede ($\alpha = 1$); (c) posição do elétron e da deformação da rede em função do tempo t para $\alpha = 0$ e (d) distância normalizada entre o elétron e a deformação da rede versus a interação elétron-rede.	76
Figura 27.	A deformação da rede Z_n versus t e n , onde $n = j - N/2 = 0$ representa o centro da cadeia. Os cálculos foram feitos para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 0,5$, $\tau = 10$ e $\alpha = 0, 1, 2, 3$	86
Figura 28.	Velocidades do mágnon [V_S (linha sólida preta)] e da deformação da rede [V_L (linha pontilhada vermelha)] versus α . Considerando que $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 0,5$ e $\tau = 2,5$ até 15.	87
Figura 29.	Distância normalizada entre o mágnon e a deformação da rede (D/D_{max}) versus α . Cálculos feitos para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 0,5$ e $\tau = 2,5$ até 15.	88
Figura 30.	O valor crítico de α_c versus τ para $\sigma_S = \sigma_L = 0.5$	89
Figura 31.	Velocidades do mágnon [V_S (linha sólida preta)] e da deformação da rede [V_L (linha pontilhada vermelha)] e versus α calculados usando $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2,5$ até 15.	89
Figura 32.	Distância normalizada entre o mágnon e a deformação da rede (D/D_{max}) versus α calculada para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2,5$ até 15.	90
Figura 33.	O valor crítico de α_c versus τ para $\sigma_S = 0.5$ e $\sigma_L = 1$	90
Figura 34.	Velocidades do mágnon [V_S (linha sólida preta)] e da deformação da rede [V_L (linha pontilhada vermelha)] e versus α calculados usando $v_0 = 1$, $\sigma_S = 1$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2.5$ até 15.	91
Figura 35.	Distância normalizada entre o mágnon e a deformação da rede (D/D_{max}) versus α calculada para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 1$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2.5$ up to 15.	91
Figura 36.	O valor crítico de α_c versus τ para $\sigma_S = \sigma_L = 1$	92
Figura 37.	a) O valor crítico α_c versus v_0 ; b) A velocidade do par mágnon-sóliton V_{SL} versus v_0 . Os cálculos foram feitos para $\sigma_L = \sigma_S = 1$ e $\tau = 10$	93
Figura 38.	Função $d(E)$ versus energia E na ausência do campo magnético ($h = 0$). Cada painel representa um valor diferente do expoente de correlação β . Vários tamanhos de sistema são considerados e cada curva é calculada fazendo em média 500 realizações distintas de desordem.	100
Figura 39.	Distribuição de probabilidade da fidelidade máxima $P(F_{max})$ versus F_{max} . Os cálculos são feitos considerando $N = 60$, $j_0 = 0.01$, $h = 0$, $E_{SR} = 0.5$ e vários valores de β . Os dados são obtidos para 3000 realizações de desordem independentes.	101

Figura 40.	Probabilidade total de ocupação do canal F_c versus j_0 para $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $h = 0$, e $\beta = 0, 1.5, 3$. As curvas são calculadas em média em 3000 realizações de desordem independentes	101
Figura 41.	F_{max} versus acoplamentos fracos externos j_0 para $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $h = 0, 0.2, 0.4$ e $\beta = 0, 1.5, 3$. As curvas são calculadas em média em 3.000 realizações de desordem.	102
Figura 42.	Fidelidade máxima F_{max} e concorrência máxima C_{max} versus β para $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0, 0.2, 0.4$. Ambas as quantidades são calculadas em média em 3000 realizações de desordem independentes.	103
Figura 43.	Fidelidade máxima F_{max} e concorrência máxima C_{max} versus tamanho do sistema N . Os parâmetros do sistema são $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0.2$, $\beta = 1.5$ e 3 . As curvas são calculadas em média com 3000 realizações de desordem distintas.	103

Sumário

	Introdução	16
1	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	20
1.1	Modelo de Bloch	20
1.2	Modelo <i>Tight-Binding</i>	22
1.3	Modelo de Anderson	24
1.3.1	Teoria de Escala	25
1.3.2	Desordem Correlacionada	28
1.4	Modelo de Hubbard	30
1.5	Elétron na presença de um campo elétrico externo	31
1.6	Interação Elétron-Fônon	33
1.7	Ondas Acústicas de Superfície (SAW) em sistemas com acoplamento elétron-rede	34
1.8	Redes Não-Lineares	35
1.8.1	Potenciais FPU	35
1.8.2	Potenciais de Morse	37
1.9	Ferromagnetismo	37
1.9.1	<i>Spin</i>	38
1.9.2	Mágnon e Modelo de Heisenberg	40
1.10	Informação Quântica	43
1.10.1	<i>Qubit</i>	43
1.10.2	Transferência de Estados Quânticos	44
1.10.3	Emaranhamento	47
1.10.4	Concorrência	48
2	SISTEMA DE DOIS ELÉTRONS EM UMA REDE CRISTALINA .	49
2.1	Introdução	49
2.2	Modelo e Formalismo	50
2.2.1	Análise Analítica	54
2.2.2	Sistema sob efeito do Campo Elétrico	56
2.3	Resultados e Discussões	58
3	SISTEMA COM ACOPLAMENTO ELÉTRON-SÓLITON E INTE- RAÇÃO CÚBICA	64
3.1	Introdução	64
3.2	Modelo e Formalismo	65

3.3	Resultados e Discussões	69
4	ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DO PAR MÁGNON-SÓLITON EM UMA CADEIA DE MORSE	78
4.1	Introdução	78
4.2	Modelo e Formalismo	79
4.3	Resultados e Discussões	86
5	TRANSFERÊNCIA DE MÁGNON EM CADEIAS COM DESOR- DEM CORRELACIONADA	95
5.1	Introdução	95
5.2	Modelo e Formalismo	96
5.3	Resultados e Discussões	99
6	CONCLUSÃO	105
	REFERÊNCIAS	107
	APÊNDICES	118
	APÊNDICE A – DESENVOLVIMENTO DOS CÁLCULOS DA FI- DELIDADE	119
	APÊNDICE B – CÁLCULOS DA CONCORRÊNCIA	123
	APÊNDICE C – MÉTODO DE TAYLOR	125
	ANEXOS	127
	ANEXO A – ARTIGO: ESTADOS LIGADOS COOPERATIVOS EM CAMINHADAS QUÂNTICAS DE PARTÍCULAS IN- TERAGENTES	128
	ANEXO B – ARTIGO: PROPRIEDADES DO PAR ELÉTRON-REDE EM CADEIAS COM INTERAÇÃO CÚBICA.	139
	ANEXO C – ARTIGO: PROPAGAÇÃO MÁGNON-REDE EM UMA CADEIA DE MORSE: O PAPEL DESEMPENHADO PELA INTERAÇÃO <i>SPIN</i>-REDE E A CONDIÇÃO INICIAL.	154

ANEXO D – ARTIGO: TRANSFERÊNCIA DO ESTADO DE MÁG- NON EM CADEIA COM DESORDEM CORRELACI- ONADA.	170
---	------------

Introdução

Ao longo dos anos, foram desenvolvidos estudos com o objetivo de descrever as propriedades eletrônicas em estruturas cristalinas. No modelo de Bloch [1, 2], o sistema em estudo é caracterizado por funções de onda estendidas, que representam estruturas cristalinas. Nesse modelo, os elétrons seguem a aproximação do elétron independente, não interagindo entre si e estando sujeitos a um potencial periódico, sendo denominados *elétrons de Bloch*. Entretanto, é sabido que os sólidos encontrados na natureza não são perfeitamente cristalinos. Em casos de presença de defeitos na estrutura do cristal, estes não podem mais ser descritos por um potencial periódico, por isto, as funções de onda não serão mais estendidas. Em 1958, Anderson propôs um modelo [3] adequado para descrever sistemas que apresentam desordem, a qual pode ser categorizada como desordem estrutural, caracterizada por uma distribuição aleatória dos átomos no sólido, e desordem composicional, que ocorre quando a rede do cristal é composta por íons diferentes e sítios vazios, por exemplo. Anderson declarou que a presença de desordem pode alterar a função de onda, resultando na falta de difusão eletrônica, o que confere ao sistema um caráter isolante.

Na teoria de Bloch, a interação entre elétrons não está presente. A abordagem desse tema é realizada no modelo de Hubbard [4], que considera N elétrons interagindo em uma rede com M sítios. Ao considerar uma banda de estados ocupada por dois elétrons sob a influência de um campo elétrico constante, verifica-se que, nessas condições, as partículas executam um movimento oscilatório denominado *oscilações de Bloch* [5]. Essas oscilações têm uma magnitude cerca de duas vezes a do campo elétrico. Em um análogo óptico, foi conduzido um estudo teórico-experimental de duas partículas correlacionadas em uma rede fotônica por Corrielli *et al.* [6], com um sistema expresso pelo Hamiltoniano Bose-Hubbard estendido. Foi demonstrado que a dinâmica de duas partículas em uma rede unidimensional pode ser mapeada para o movimento de uma partícula em uma rede bidimensional. Essa rede 2D foi fabricada em um substrato de sílica. No decorrer deste estudo, observaram-se pela primeira vez as oscilações fracionárias de Bloch (duplicação da frequência para dois bósons). Em uma simulação experimental das oscilações de Bloch conduzida por Zhang *et al.* [7], foram utilizados circuitos elétricos projetados para dois anyons¹. Ao mapear os auto-estados, foram verificadas as oscilações de Bloch de dois bósons e dois pseudo-férmions². Além disso, constatou-se que o período de oscilação dos bósons é quase o dobro do período de oscilação para dois pseudo-férmions. Em um sistema óptico com dois átomos bosônicos interagindo, a presença de oscilações de Bloch

¹ Os anyons são quase-partículas quânticas com estatísticas intermediárias entre as de bósons e férmions

² Partículas que, embora sejam bósons, comportam-se como férmions em diferentes sítios da rede.

fortemente correlacionadas foi verificada por Preiss *et al.* [8]. Longhi [9] formulou uma proposta teórica para a realização fotônica das oscilações de Bloch em um sistema de dois elétrons correlacionados em uma rede periódica unidimensional. O autor sugeriu monitorar o caminho espacial percorrido pelo feixe óptico. Em um estudo conduzido por Krimer *et al.* [10], foi modelada a interação bóson-bóson em redes ópticas 2D.

No modelo de Anderson mencionado anteriormente, a mobilidade dos átomos da rede não foi considerada, ou seja, a teoria foi construída a partir da aproximação de Born-Oppenheimer. Se o sistema apresentar um acoplamento elétron-fônon, isso resultará em uma dependência da temperatura com a resistividade elétrica, indicando que o aumento da temperatura levará a um aumento no número de fônons, resultando em maior dispersão de elétrons [2]. A interação elétron-fônon pode ser compreendida melhor quando associada a uma quase-partícula chamada *polaron*. Em 1933, Lev Landau postulou a possibilidade de um elétron em movimento em um cristal iônico ser capturado devido à sua interação com os fônons da rede [11]. No entanto, somente em 1946, Pekar definiu o termo *polaron* e o descreveu como um estado em que o elétron está fortemente acoplado à polarização induzida pelo deslocamento dos átomos ao redor do elétron, gerando um campo de polarização no cristal [12, 13]. Portanto, devido a essa interação, o elétron possui maior mobilidade do que em um cristal com desordem estrutural [1].

Sistemas que exibem interação elétron-fônon podem manifestar maior suscetibilidade no transporte de cargas através do confinamento de elétrons em “ondas solitárias” (*solitons*), definidas como fenômenos ondulatórios não-lineares e altamente estáveis [14]. Para induzir o transporte eletrônico por meio de excitações solitônicas, é necessário introduzir o termo de acoplamento elétron-fônon na energia *on-site* [15] ou no *hopping* [16]. O acoplamento com o *hopping* é realizado pelo modelo SSH (Su-Schrieffer-Heeger), que postula que uma força atuando entre átomos vizinhos em uma rede pode ser representada pela adição de um termo não-linear cúbico ou quártico, introduzindo correções cúbicas e quadráticas na lei de Hooke [17]. Essas correções são conhecidas como γ -FPU (γ -Fermi-Pasta-Ulam) e β -FPU (β -Fermi-Pasta-Ulam). Em 1929, Morse [18] apresentou um modelo descrevendo a propagação de modos vibracionais em redes não-lineares, estudando as propriedades físicas de uma rede unidimensional com potencial representado por uma exponencial dependente da distância entre sítios vizinhos [19, 20, 21].

Para contextualizar um dos trabalhos dessa tese, será discutido adiante o conceito de redes não-lineares³. Uma área digna de atenção é a propagação de ondas acústicas em superfícies (*Surface Acoustic Waves* - SAW). Em um trabalho pioneiro conduzido por Lord Rayleigh [22], foi investigada a propagação de ondas em uma superfície de um sólido elástico isotrópico e homogêneo. Décadas depois, outros estudos foram realizados

³ Redes não-lineares referem-se a sistemas físicos cujo comportamento não pode ser descrito por relações lineares simples, ou seja, que as interações entre os componentes do sistema não seguem uma relação linear de causa e efeito.

para explorar materiais fundamentados nos princípios físicos das SAW [23]. Na pesquisa conduzida por Mayer [24], foi realizado um estudo teórico sobre SAW em meios não-lineares. No trabalho realizado por McNeil *et al.* [25], os autores deslocaram um elétron ao longo de um canal utilizando SAW. No estudo experimental feito por Takada *et al.* [26], foi demonstrado que em heteroestruturas semicondutoras como GaAs/AlGaAs, a propagação eletrônica entre pontos quânticos distantes pode ser alcançada utilizando SAW.

No âmbito deste trabalho, aborda-se mais um tópico relevante relacionado às quase-partículas conhecidas como mágnons, as quais estão associadas à excitação coletiva de *spins* em sólidos magnéticos. A origem dos mágnons decorre das interações entre os *spins* dos elétrons nos átomos magnéticos de um material. Em materiais magnéticos, como ferromagnetos ou antiferromagnetos, os *spins* dos elétrons apresentam alinhamento ordenado. Quando uma perturbação externa é aplicada, tal como um campo magnético ou uma variação na temperatura, os *spins* entram em um estado excitado, e essa excitação coletiva dos *spins* é denominada mágnon. Mágnons possuem propriedades notáveis e desempenham um papel significativo na teoria da magnetização de sólidos, contribuindo para a compreensão das propriedades magnéticas desses materiais. Sua relevância é crucial para a compreensão das tendências magnéticas em materiais e para o avanço no campo da física de materiais magnéticos. No estudo conduzido por Luo *et al.* [27], foi documentada a primeira observação da hibridização coerente de mágnons e fônons em um monocamada antiferromagneto $FePSe_3$ por espectroscopia magneto-Raman. Em outra pesquisa realizada por Xu *et al.* [28], foi experimentalmente demonstrado um novo caminho fundamental para investigar o acoplamento entre mágnons e fônons.

Por fim, o último tópico de interesse é referente a informação quântica, que está relacionada às propriedades e características da informação, intimamente vinculadas aos princípios da mecânica quântica. Um dos conceitos fundamentais na teoria da informação quântica é o *bit* quântico (*qubit*). Enquanto os *bits* clássicos representam informação como 0 ou 1, os *qubits* são unidades básicas de informação na computação quântica e podem existir em uma superposição de estados, representados como $|0\rangle$ e $|1\rangle$, ou combinações lineares de ambos. Essa propriedade permite que os *qubits* realizem cálculos em paralelo, explorando o conceito de superposição. No âmbito da informação quântica, destaca-se a transferência de estados quânticos, um processo que envolve o transporte de informações quânticas de um sistema quântico para outro, frequentemente separados espacialmente. Esse processo desempenha um papel significativo em contextos como computação quântica, comunicação quântica e criptografia quântica. Um aspecto relevante sobre esse tema é o compartilhamento de informações. Em sistemas quânticos, é possível compartilhar informações de maneiras que se distinguem fundamentalmente das formas de comunicação clássicas. Isso engloba a transferência de *qubits* entre sistemas quânticos, possibilitando o processamento ou a leitura de informações em locais remotos. No contexto histórico, o trabalho precursor sobre comunicação quântica de curta distância foi proposto por Bose

[29], que desenvolveu teoricamente um esquema utilizando um sinal não modulado e uma cadeia de *spin* como canal para comunicações quânticas de curta distância. Nesse esquema, o estado a ser transmitido é inserido no início da rede e recebido posteriormente no final da mesma.

O presente trabalho está estruturado da seguinte forma: no Capítulo 1, é elaborada uma fundamentação teórica sobre as propriedades de transporte em sistemas cristalinos e desordenados, abordando especificamente o teorema de Bloch e a teoria de localização de Anderson. Além disso, são apresentados modelos que consideram a influência da interação coulombiana no transporte eletrônico. A seguir, é tratado o comportamento de um elétron sob a influência de um campo elétrico constante e uniforme utilizando uma abordagem semi-clássica. Em seguida, é feita uma breve descrição da teoria que considera a interação elétron-fônon. Nas seções subsequentes, são definidas ondas acústicas de superfície em sistemas com acoplamento elétron-rede, e redes não-lineares são abordadas no contexto de transporte eletrônico. Posteriormente, é realizada uma breve revisão dos conceitos de *spin* e mágnon. Por fim, é introduzida, no âmbito da conjectura de informação quântica, a definição de *qubit* e determinado o protocolo de transferência de estados quânticos. No Capítulo 2, é apresentado um estudo sobre elétrons interagentes em uma rede cristalina unidimensional. Em seguida, é mostrado o formalismo utilizado nesse estudo, tanto com quanto sem a presença do campo elétrico, e os resultados obtidos são apresentados juntamente com as conclusões. Logo depois, no Capítulo 3, é abordada uma investigação do transporte eletrônico na presença de interação elétron-rede, considerando que a rede possui um potencial não-linear cúbico. O formalismo adotado para esse estudo foi o do modelo SSH, e na próxima seção são apresentados os resultados e conclusões. Avançando para o Capítulo 4, é apresentado um estudo sobre a dinâmica do mágnon acoplado com a rede, em que a rede possui potenciais anarmônicos descritos por exponenciais. Os resultados obtidos são apresentados juntamente com as conclusões. Logo depois, no Capítulo 5, explora-se o modelo de Heisenberg unidimensional para *spin* 1/2 na presença de desordem correlacionada nos termos de troca, no contexto de transferência de estados quânticos. Por fim, o Capítulo 6 é constituído das conclusões gerais e perspectivas para futuros trabalhos.

1 Fundamentação Teórica

1.1 Modelo de Bloch

Com a descoberta do elétron realizada por J. J. Thomson em 1897, surgiu um crescente interesse em estudar a condução elétrica nos sólidos. Três anos após essa descoberta, uma teoria de condução elétrica e térmica foi proposta por Drude [30], fazendo uso da bem-sucedida teoria cinética dos gases. As principais considerações feitas por Drude para o desenvolvimento de seu trabalho foram as seguintes [1]: além das colisões, os íons não têm nenhum efeito no movimento dos elétrons; os elétrons não interagem entre si; a colisão não depende da configuração dos elétrons no instante em que elas ocorrem. No entanto, na natureza, os elétrons em um sólido estão sujeitos à interação com íons da rede e, inclusive, à interação entre eles próprios. Em decorrência disso, novos modelos foram propostos, como o Modelo de Bloch [31].

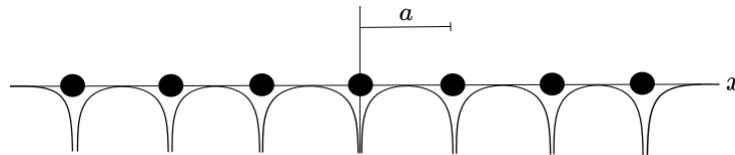


Figura 1. Rede unidimensional com potencial periódico.

Fonte: Autor (2022).

Os elétrons não interagentes se aproximam de uma rede unidimensional periódica formada de N íons monoatômicos com uma constante de rede a (ver Fig. 1). Como os íons são todos iguais, a energia potencial da interação entre os elétrons e esses íons tem sempre o mesmo valor em qualquer sítio, logo, a energia potencial obedece à relação:

$$V(x) = V(x + a) = V(x + 2a) = V(x + 3a) = \dots = V(x + (N - 1)a), \quad (1.1)$$

onde $-a/2 < x \leq a/2$. Como $n = N - 1$, o potencial é escrito da seguinte forma $V(x + na)$, no qual, $-a/2 + na < x \leq a/2 + na$, e n assume os seguintes valores ($n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$). Por conta disso, um íon na posição $x = 0$ corresponde a outro na posição $x = Na$, assim,

$$V(x) \equiv V(x + Na). \quad (1.2)$$

Na teoria de Bloch é possível determinar os estados eletrônicos de redes cristalinas e o seu Hamiltoniano é composto por um termo cinético, referente ao deslocamento dos

elétrons na rede, e um termo potencial, que corresponde à interação elétron-íon. Logo, a equação de Schrödinger unidimensional é dada por:

$$H\Phi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x). \quad (1.3)$$

Como $V(x)$ obedece à relação (1.2), a Eq.(1.3) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$H\Phi(x + Na) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x + Na)}{dx^2} + V(x + Na)\Phi(x + Na) = E\Phi(x + Na). \quad (1.4)$$

Dessa forma, as funções de onda $\Phi(x)$ e $\Phi(x + Na)$ têm o mesmo autovalor de energia E , que diferem entre si apenas por um fator de fase γ , ou seja,

$$\Phi(x + Na) = \gamma^N \Phi(x) \quad \gamma^N = 1. \quad (1.5)$$

A função $\gamma = \exp\left(\frac{2i\pi n}{N}\right)$ pode satisfazer a relação anterior, no qual, $n = 0, \dots, N-1$. Portanto, a função de onda $\Phi(x)$ para uma rede linear com periodicidade a é definida por:

$$\Phi(x) = \exp\left(\frac{2i\pi nx}{Na}\right) u(x), \quad (1.6)$$

no qual $u(x)$ é uma função arbitrária em a e obedece a expressão $u(x + na) = u(x)$.

O teorema de Bloch pode ser escrito para um cristal tridimensional usando o vetor $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, onde n_i são números inteiros e \mathbf{a}_i são vetores primitivos da rede, que equivale ao espaçamento a em uma determinada direção. Logo, a função de onda $\Phi(\mathbf{r})$ na presença de um potencial periódico é expressa da seguinte forma:

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ satisfaz a relação $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e \mathbf{k} é o vetor de onda. Tendo conhecimento da Eq.(1.7), Bloch sugeriu que as autofunções da equação de onda eletrônica para um potencial periódico tratam-se de um produto de uma onda plana $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ por uma função $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, que apresenta a mesma periodicidade da rede cristalina [2].

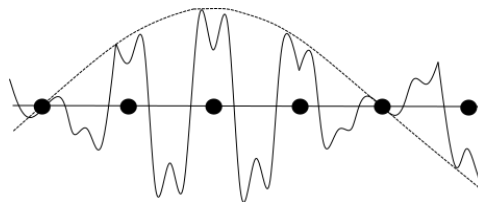


Figura 2. Função de onda de Bloch.

Fonte: Autor (2022).

A função de onda de Bloch, em geral, não é periódica, mesmo que o potencial seja periódico. Isso pode ser verificado calculando $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$:

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

assim, quando a função de onda é deslocada por um vetor \mathbf{R} , é obtido a mesma função de onda multiplicada por uma fase. A função de Bloch está ilustrada na Fig. 2, assim, é possível observar que a onda plana (linha tracejada) pode ser interpretada como um “envelope” senoidal, que possui oscilações de grande comprimento de onda, em cima do qual é superposta uma função periódica que oscila rapidamente.

Como Bloch desconsiderou a interação entre as partículas presentes no sólido e não previu a presença de impurezas que poderiam interferir na condução, uma nova teoria foi desenvolvida por P.W. Anderson e apresentada à comunidade científica. Essa teoria incorporava o efeito da desordem e como ela interferia na função de onda eletrônica. O modelo de Anderson será detalhadamente abordado na Seção (1.3).

1.2 Modelo *Tight-Binding*

Em física da matéria condensada, um modelo teórico conhecido como modelo *tight-binding* descreve a estrutura eletrônica de vários sólidos cristalinos, incluindo isolantes, semicondutores e metais. Ele é usado para estudar as propriedades eletrônicas de sólidos com elétrons fortemente confinados a átomos individuais. Para desenvolver esse modelo, é necessário examinar o comportamento de elétrons não-interagentes em uma cadeia atômica. Para simplificar, o limite estático da cadeia é considerado, ou seja, sem fônons. Inicialmente, supõe-se a presença de apenas um orbital¹ por sítio na rede. No limite em que $a \rightarrow \infty$, os elétrons ficam fortemente localizados em seus respectivos íons, e nada acontece. Esse limite é conhecido como limite atômico [32]. Nesse limite, as funções de onda dos sítios vazios são ortogonais, ou seja, $\langle n|m \rangle = \delta_{n,m}$. Agora, gradualmente aproximam-se os átomos, de modo que as funções de onda possuam um pequeno “*overlap*”. Isso permite que um elétron possa mover-se para sítios vizinhos com uma amplitude de probabilidade $-T$, mais conhecida como *hopping*. Essas situações estão ilustradas na Fig. 3.

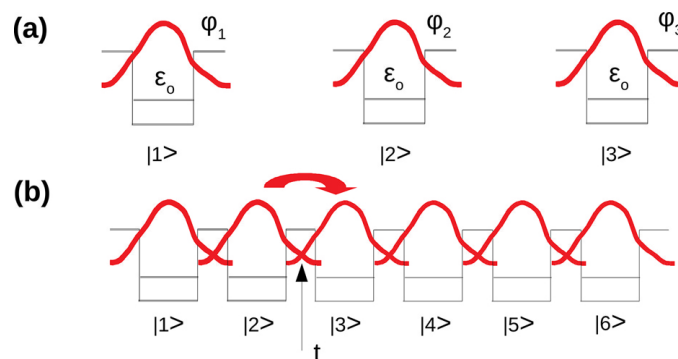


Figura 3. (a) Átomos desacoplados. (b) Átomos acoplados através da energia de *hopping*.

Fonte: Figura adaptada de Costa *et al.* (2020) [33].

¹ Um orbital é a região do espaço onde existe probabilidade de se encontrar o elétron.

Contudo, ainda deve-se assumir que $\langle n|m \rangle \approx \delta_{n,m}$, de modo que esses estados dos sítios ainda formem um conjunto completo, isto é, $\sum_m |m\rangle \langle m| = 1$. Isto é verdade de maneira geral quando se toma $|m\rangle$ não como uma função de onda atômica, mas como uma combinação de funções de onda atômicas. Essas são conhecidas como funções de Wannier. Portanto, é possível escrever o Hamiltoniano *tight-binding* da seguinte forma:

$$H = \epsilon_0 \sum_n |n\rangle \langle n| - T \sum_{n,m} |n\rangle \langle m|, \quad (1.9)$$

onde ϵ_0 representa a energia *on-site*. O primeiro termo são diagonais e o segundo são não-diagonais. Para uma rede 1D esse Hamiltoniano pode ser escrito da seguinte maneira:

$$H = \epsilon_0 \sum_n |n\rangle \langle n| - T \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n\rangle \langle n-1|). \quad (1.10)$$

Para encontrar as autoenergias do problema a solução deve ser dada por modos normais, como no caso das vibrações da cadeia harmônica. Por isso, a seguinte solução é possível:

$$|n\rangle = \sum_{k \in 1^{\text{a}} ZB} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna} |k\rangle. \quad (1.11)$$

Essa solução é a transformada de Fourier do estado $|n\rangle$. Devido à periodicidade da rede, contudo, k é momento cristalino e pertence à primeira zona de Brillouin. Fazendo a

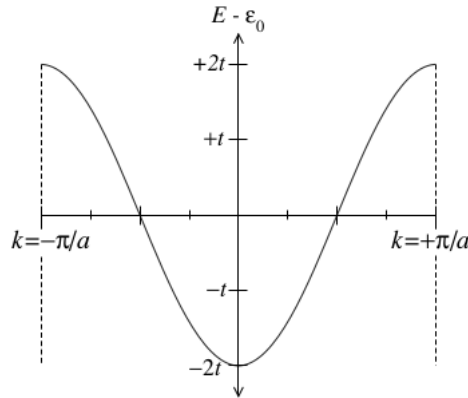


Figura 4. Banda de energia para um modelo *tight-binding* com um orbital por sítio. A energia é plotada em função do vetor de onda na primeira zona de Brillouin.

Fonte: Simon (2013) [32].

substituição desta solução no Hamiltoniano (1.10), obtém-se:

$$H = \sum_k \epsilon(k) |k\rangle \langle k|, \quad (1.12)$$

com $\epsilon(k) = \epsilon_0 - 2T \cos ka$. H é diagonal com autovalores dados por $\epsilon(k)$. Esse é o espectro ou relação de dispersão. Essa relação mostra que os elétrons podem assumir um valor

máximo ($\epsilon_0 + 2T$) e um valor mínimo ($\epsilon_0 - 2T$). Isso quer dizer que os elétrons detêm auto-estados apenas dentro de uma banda de energia, como mostrado na Fig. 4. A diferença entre a E_{MAX} e E_{MIN} fornece a largura da banda. No exemplo $W = 4T$, essa é uma medida da energia cinética dos elétrons. Se $T \neq 0$, os elétrons diminuem a energia se deslocalizando.

1.3 Modelo de Anderson

Em um trabalho publicado em 1958, P. W. Anderson [3] apresentou um modelo que considera os elementos principais para o estudo da natureza dos estados eletrônicos em sistema com desordem, e com isso, estudar uma vasta variedade de fenômenos em metais. O Hamiltoniano desse modelo é descrito em termos da energia cinética do elétron e da energia potencial do sítio, que no formalismo de segunda quantização é dado por:

$$H = \sum_n \epsilon_n c_n^\dagger c_n - \sum_{n \neq m} T_{nm} c_n^\dagger c_m, \quad (1.13)$$

onde T_{nm} é a amplitude de *hopping* ou elemento de matriz do Hamiltoniano entre os sítios n e m e diminui rapidamente com a distância entre eles. O termo ϵ_n é a energia do sítio n e se trata de um número aleatório que está dentro de um intervalo de largura W , chamado de largura da desordem. Esse termo simula um potencial aleatório (ver Fig. 5) e pode ser escolhido de uma certa distribuição de probabilidade, seja ela gaussiana ou uniforme, por exemplo. Os coeficientes c_n^\dagger e c_n são os operadores de criação e aniquilação, respectivamente, de um elétron no sítio n .

Usando a equação de Schrödinger independente do tempo $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$, em que $|\Phi\rangle$ representa o conjunto dos autoestados do Hamiltoniano H . Utilizando a expansão dos autoestados nas bases de orbitais atômicos ($|\Phi\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$) e projetando $|\Phi\rangle$ na Eq.(1.13), é obtido:

$$E f_n = \epsilon_n f_n - \sum_m T_{nm} f_m. \quad (1.14)$$

Se considerar que os potenciais estão distribuídos sobre uma rede retangular e que só existem amplitude de *hopping* de mesma amplitude entre os p primeiros vizinhos, a expressão (1.14) toma a forma:

$$E f_n = \epsilon_n f_n - T \sum_{m=1}^{m=p} f_{n+m}, \quad (1.15)$$

no qual, a soma se estende em torno dos p vizinhos mais próximos do sítio m . O modelo de Anderson tem comportamento diferente para duas situações, são elas:

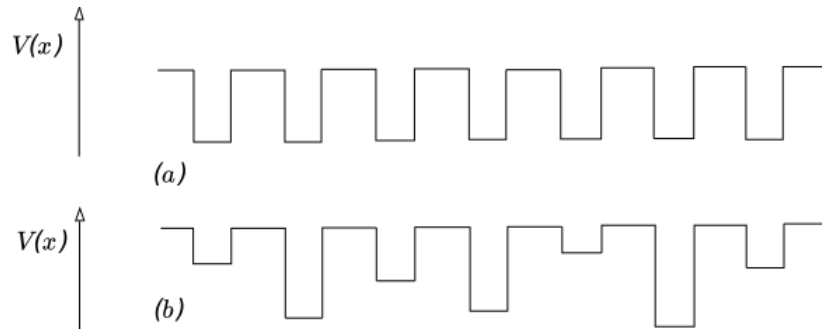


Figura 5. (a) Potencial Periódico; (b) Potencial Aleatório.

Fonte: Autor (2022).

- **Rede Cristalina:** Para um sistema cristalino (estados estendidos) linear, deve-se considerar que $W = 0$, com isso, a energia de sítio ϵ_n são as mesmas, que por conveniência, é tomada $\epsilon_n = 0$, logo, a Eq.(1.15) pode ser reescrita como:

$$Ef_n = -T(f_{n-1} + f_{n+1}). \quad (1.16)$$

Para resolver a Eq.(1.16), a solução proposta é do tipo $f_n = f_0 e^{ink}$, feito isso, chega-se a solução: $E = 2T \cos(k)$. Como demonstrado na seção (1.2), esse resultado representa a largura da banda cristalina da teoria de *Bloch* ($-2T < E < 2T$). Para o caso unidimensional, onde o número de vizinhos mais próximos é $p = 2$, a largura da banda cristalina é $B = 4T$. Generalizando esse resultado para um sistema de D dimensões com número de vizinhos p a largura da banda é $B = 2pT$.

- **Rede Desordenada:** Para um sistema desordenado (estados localizados), deve-se considerar que $W \neq 0$ e $T = 0$, a solução do problema seriam os orbitais atômicos. E o caso não trivial (T e W não nulos) foi investigando por *Anderson* com o auxílio da teoria de perturbação.

1.3.1 Teoria de Escala

A teoria de escala foi proposta por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan para explicar a dependência da transição metal-isolante com a dimensão do sistema [34]. Os autores propuseram que a condutância generalizada g é responsável por essa mudança de fase, considerando temperatura nula. O ponto de partida foi a reinterpretação do modelo de Anderson feito por Thouless [35], nele o sólido é formado por blocos de volume l^D que comportam vários sítios, logo, o sistema todo é gerado por diversos blocos acoplados uns aos outros. A energia *on-site* (ϵ_n) é substituída pelo espaçamento médio entre os níveis (ΔE) e o *hopping* (T) pelo deslocamento δE causado por mudanças nas condições de contorno. Para atravessar cada bloco, um elétron gasta um dado tempo t_{df} ,

onde esta quantidade e δE se relacionam através da relação [36]

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_{d_f}}. \quad (1.17)$$

Com a análise dessa equação, é possível notar que quanto maior for o tempo gasto para o elétron atravessar o bloco, menor será a sensibilidade do sistema. Agora, assumindo que o elétron atravessa o bloco em concordância com o movimento browniano,

$$t_{d_f} = \frac{L^2}{D_f} \rightarrow D_f = \frac{L^2}{t_{d_f}}, \quad (1.18)$$

onde L é a dimensão do bloco e D_f se trata da constante de difusão. Reescrevendo a Eq.(1.17) da seguinte forma

$$t_{d_f} = \frac{\hbar}{\delta E}. \quad (1.19)$$

Substituindo a Eq.(1.19) na Eq.(1.18), tem-se

$$D_f = \frac{\delta E L^2}{\hbar}. \quad (1.20)$$

Agora, substituindo a Eq.(1.20) na relação de Einstein ($\sigma = e^2 D_f n(E)$), é obtido que

$$\sigma = \frac{e^2 \delta E L^2 n(E)}{\hbar} \rightarrow \delta E = \frac{\hbar \sigma}{e^2 L^2 n(E)}. \quad (1.21)$$

Esta equação relaciona a variação na energia dos blocos e o número de estados por volume. $n(E)$ pode ser reescrita em função do espaçamento médio entre os níveis da seguinte forma

$$n(E) = \frac{1/\Delta E}{L^d} \quad (1.22)$$

ou

$$\Delta E = \frac{1}{n(E)L^d}. \quad (1.23)$$

Agora, definindo a relação

$$\frac{1}{g} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}, \quad (1.24)$$

em que g é a condutância. Essa razão é interpretada como a intensidade da desordem no sistema (análogo a W/J no modelo de Anderson). Os estados estendidos são suscetíveis a mudança nas condições de contorno, ou seja, $\delta E > \Delta E$, ao contrário do que acontece

com os estados localizados ($\delta E < \Delta E$) que não apresentam esse comportamento. Agora, substituindo as Eqs.(1.21) e (1.23) na Eq.(1.24), obtém-se

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2}. \quad (1.25)$$

Esta equação é válida apenas a estados estendidos no limite macroscópico. O termo $L^{d-2}\sigma$ se trata da condutância de um cubo d -dimensional de lado L e condutividade σ , assim, $g(L)$ é a condutância generalizada em unidades de e^2/L .

De acordo com Abrahams *et al.* [34], a principal suposição que deve ser compreendida é que para um sistema suficientemente grande, a função de dependência com a condutância é dada pela taxa de variação com L

$$\beta(g) = \frac{\partial \ln g}{\partial \ln L}. \quad (1.26)$$

No limite de grandes condutâncias ($g \rightarrow \infty$), pode-se usar a dependência em L da condutância. Fazendo uso da Eq.(1.26), tem-se

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = \frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} = \frac{\partial \ln(\sigma L^{d-2})}{\partial \ln L} = d - 2. \quad (1.27)$$

Portanto, para esse limite, β pode assumir os seguintes valores

$$\beta(\infty) = \begin{cases} +1, & \text{para } d = 3; \\ 0, & \text{para } d = 2; \\ -1, & \text{para } d = 1. \end{cases} \quad (1.28)$$

Como pode ser verificado na Fig. 6, com g pequeno, ou seja, no limite de baixo acoplamento e forte desordem, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos são localizados e decaem exponencialmente com a distância.

Dentro de um volume de dimensão L , a amplitude da função de onda de um elétron localizado no bloco é da ordem de $e^{-\gamma L}$, onde γ é o expoente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização λ , $\gamma = 1/\lambda$). Fazendo uso novamente da Eq.(1.26) é obtido que

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} = \ln g. \quad (1.29)$$

Assim, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende à zero, sem depender da dimensão. É importante ressaltar que em $d = 3$ existem dois comportamentos, são eles:

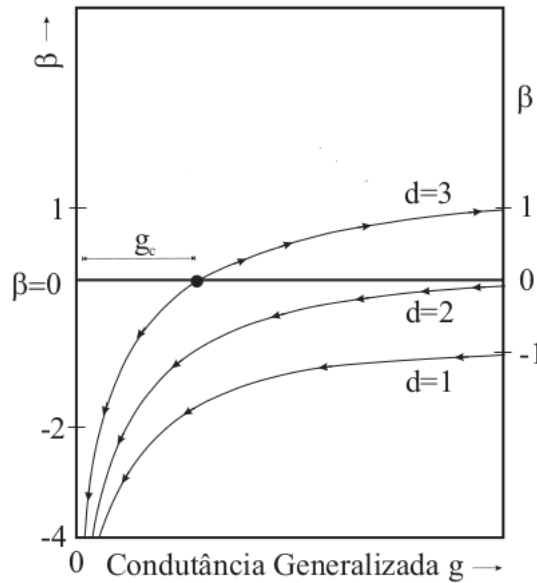


Figura 6. Comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala.

Fonte: Figura Adaptada de Abrahams *et al.* (1979) [34].

- Para valores menores que um certo g_c [$\beta(g) < 0$], as curvas indicam que a condutância generalizada g diminui quando L cresce;
- Acima de g_c [$\beta(g) > 0$] o comportamento é contrário, ou seja, g cresce quando L cresce.

O ponto no diagrama [$g_c, \beta(g_c) = 0$] é chamado de ponto fixo instável. Para $d = 1$ e $d = 2$, o diagrama indica que g sempre diminui quando L cresce. Essa diagramação indica a dependência da transição de Anderson com a dimensão.

Na literatura, encontram-se numerosos trabalhos que tratam da transição metal-isolante. Em [37, 38], é conduzida uma revisão teórica dos avanços conceituais até então desenvolvidos sobre sistemas desordenados, examinando também alguns experimentos realizados. Devido à coerência da mecânica quântica das funções de onda de elétrons em materiais com imperfeições, ocorreu uma revisão na teoria da condutividade elétrica [39]. Belitz *et al.* [40] elaboraram uma teoria geral de escala de transições metal-isolante e correlatas. Além disso, são discutidas ideias físicas relevantes e abordagens fenomenológicas para a transição metal-isolante.

1.3.2 Desordem Correlacionada

Anderson foi o pioneiro no estudo das propriedades de localização de sistemas desordenados [3], demonstrando a presença de estados localizados devido à desordem no sistema. No entanto, quando são introduzidas correlações locais, nem todos os estados permanecem localizados, indicando a existência de estados estendidos que modificam as

propriedades de condução [41]. Para introduzir essa desordem, as correlações podem ser derivadas de sistemas físicos conhecidos, como o DNA, ou pode-se empregar séries aleatórias com correlação. A adição de desordem correlacionada ou sequências pseudo-aleatórias revela um comportamento não convencional do modelo de Anderson unidimensional. Em 1989, Flores [41] demonstrou que a introdução de correlações entre o *hopping* e o potencial diagonal (energias *on-site*) no Hamiltoniano de Anderson resulta na transmissão da função de onda.

Sequências com correlações de longo alcance exibem uma densidade espectral que segue uma lei de potência, ou seja, $S(k) = 1/k^\alpha$, onde $S(k)$ representa a transformada de Fourier da função correlação de dois pontos. Utilizando essa correlação, de Moura *et al.* [42] demonstraram que a correlação de longo alcance induz uma transição metal-isolante em sistemas unidimensionais, e a desordem nesse sistema segue o Movimento Browniano Fracionário (MBF) com uma densidade espectral dada por $S(k) \propto 1/k^\alpha$, sendo α o parâmetro que controla o grau de correlação da sequência. Para este estudo, os autores empregaram uma densidade espectral do tipo [43]

$$x_i = x(t_i) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(\omega_k) \Delta\omega)^{1/2} \cos(\omega_k t_i + \phi_k), \quad (1.30)$$

no qual se trata da posição de uma partícula nos instantes $t_i = i\tau$, onde τ é o intervalo entre duas observações sucessivas. $\omega_k = k\Delta\omega$, em que $\Delta\omega = 2\pi/T$ é a frequência fundamental e ϕ_k são as fases distribuídas entre $[0, 2\pi]$ que se comportam como uma fonte de ruído da série. Tomando $\tau = 1$ e $S(\omega_k) = 1/\omega_k^\alpha$, a Eq.(1.30) pode ser reescrita da seguinte maneira

$$x_i = \sum_{k=1}^{N/2} \left[k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos\left(\frac{2\pi ik}{N} + \phi_k\right), \quad (1.31)$$

onde α é responsável por controlar as correlações desta sequência. Por exemplo, para $\alpha = 0$, se obtém uma sequência aleatória, ou seja, sem correlações, também conhecido como ruído branco. Para $\alpha = 2$, é possível obter o Movimento Browniano Simples, ou melhor, a sequência obtida não possui correlações entre os incrementos. Com a intenção de usar a sequência x_i no modelo de Anderson representado as energias *on-site* (ϵ_i), de Moura *et al.* [42], reescreveram a Eq.(1.31) da seguinte forma

$$\epsilon_i = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{C(\alpha)}{k^{\alpha/2}} \cos\left(\frac{2\pi ik}{N} + \phi_k\right), \quad (1.32)$$

onde $C(\alpha)$ é selecionada de forma que obedeça a $\Delta\epsilon_i = \sqrt{\langle \epsilon_i^2 \rangle - \langle \epsilon_i \rangle^2} = 1$. Isso faz com que as amplitudes da sequência não dependam do tamanho da rede. Um gráfico da Eq.(1.32) para $N = 2 \times 10^4$ é ilustrado na Fig. 7.

Sequências aleatórias com correlações de longo alcance se caracterizam por não apresentarem comprimento de escala característico [44]. Em 1998, Russ *et al.* [45] estudaram

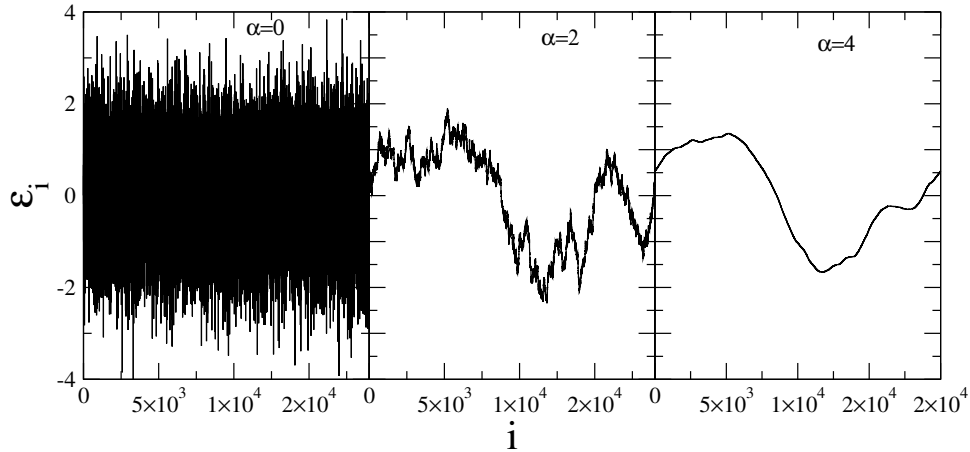


Figura 7. Números gerados pela Eq.(1.32) com parâmetros de correlação dados por $\alpha = 0, 2$ e 4.

Fonte: Autor (2023).

o modelo de Anderson $1d$ com desordem que apresenta correlação de longo alcance. O potencial diagonal exibe uma função de correlação da forma $C(l) \propto l^{-\gamma}$, onde γ é uma constante positiva. Neste trabalho foi demonstrado que todos os estados eletrônicos são localizados, mas o comprimento de localização diverge para $\gamma \rightarrow 0$.

Na próxima seção, é descrito um modelo que considera a interação repulsiva entre elétrons presentes em um sólido.

1.4 Modelo de Hubbard

Até agora foram descritos os modelos de Bloch e Anderson, ambos desconsideravam a interação entre os elétrons presentes no sistema. Na década de 60, John Hubbard [4, 46, 47] propôs um modelo que considera essa interação e descreve a dinâmica dos estados eletrônicos do sistema. O Hamiltoniano de Hubbard é dado por:

$$H = U \sum_n c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} - T \sum_{n,m} (c_{n\uparrow}^\dagger c_{m\uparrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{m\downarrow}), \quad (1.33)$$

onde $c_{n\uparrow}^\dagger$ é o operador de criação de um elétron de *spin up* no sítio n e $c_{m\downarrow}$ é o operador de aniquilação de um elétron de *spin down* no sítio m . U é a energia de Coulomb sobre o sítio, com isso, o segundo termo do Hamiltoniano aponta que a energia do sistema é crescente em U quando dois elétrons de *spins* opostos ocuparem o mesmo sítio.

Na literatura é possível encontrar uma variação do modelo de Hubbard, o chamado modelo de Hubbard estendido [48], que inclui um termo de repulsão coulombiana entre elétrons de sítios vizinhos. O Hamiltoniano é dado por:

$$H = U \sum_n c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} + V \sum_{\langle n,m \rangle} c_n^\dagger c_n c_m^\dagger c_m - T \sum_{n,m} (c_{n\uparrow}^\dagger c_{m\uparrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{m\downarrow}), \quad (1.34)$$

no qual a interação coulombiana entre dois elétrons em sítios vizinhos é V . A notação $\langle n, m \rangle$ representa a soma sobre os possíveis pares de sítios vizinhos mais próximos. Na Fig. 8 é possível visualizar como se comporta cada termo do Hamiltoniano.

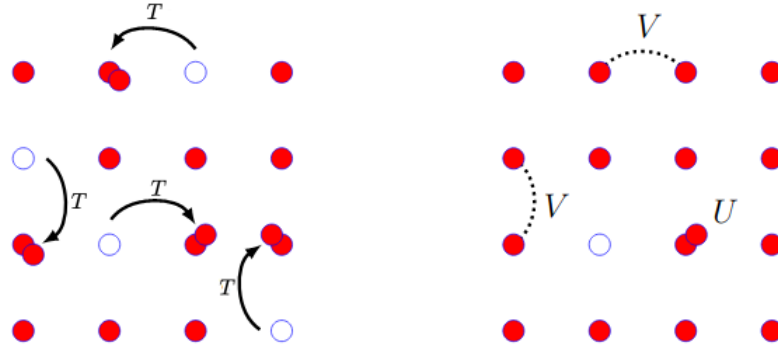


Figura 8. Ilustração do modelo de Hubbard estendido. Os elétrons se movem através do *hopping* T entre os primeiros vizinhos, e interagem entre si através da interação local U e não local V .

Fonte: Figura adaptada de Pavarini *et al.* (2016) [49].

Em 1968, E. H. Lieb e F. Y. Wu [50] encontraram uma solução exata para o modelo de Hubbard unidimensional. Depois disso, muitas tentativas foram feitas para encontrar uma solução exata para esse modelo para dimensões espaciais maiores ($d > 1$), mas até o momento encontrou-se muita dificuldade para realizar esse estudo, exceto, para alguns casos limites ($T = 0$ e $U = 0$) e até mesmo para dimensões espaciais infinitas ($d = \infty$) [51].

Na seção seguinte é feita uma descrição semi-clássica do comportamento de um elétron em uma rede unidimensional na presença de um campo elétrico externo.

1.5 Elétron na presença de um campo elétrico externo

Na teoria semi-clássica a interação elétron-íon é desenvolvida quanticamente usando a estrutura de bandas $\epsilon(\mathbf{k})$, sendo obtida, a partir da solução da equação de Schrödinger e a interação entre o elétron e o campo elétrico é descrita classicamente. Com o uso dessa abordagem é possível descrever um elétron em uma rede unidimensional, e para isso, as equações clássicas de Hamilton para a posição \mathbf{r} e momento \mathbf{p} devem ser usadas,

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad \text{e} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}. \quad (1.35)$$

A quantização do momento do elétron é usada tomando $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, onde \mathbf{k} é o vetor de onda. Para obter a velocidade de um pacote de onda deve-se usar a primeira equação de (1.35), logo,

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}. \quad (1.36)$$

O Hamiltoniano do sistema é

$$H = T + V = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{r}). \quad (1.37)$$

Substituindo (1.37) em (1.36),

$$\mathbf{v} = \frac{\partial[\epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{r})]}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p}/\hbar)}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (1.38)$$

Agora, fazendo uso da segunda equação de (1.35)

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\partial[\epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{r})]}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}; \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Como $V(\mathbf{r})$ é a energia potencial de um elétron em um campo eletrostático uniforme, a relação $-\nabla V(\mathbf{r})$ nada mais é do que a força clássica atuando sobre o elétron, logo, a relação (1.39) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\mathbf{F}, \quad (1.40)$$

onde \mathbf{F} é o campo elétrico externo. Integrando (1.40) no tempo

$$\begin{aligned} \hbar \int_0^t \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} dt &= (-e)\mathbf{F} \int_0^t dt \Rightarrow \hbar[\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] = (-e)t\mathbf{F}; \\ \mathbf{k}(t) &= \mathbf{k}(0) + \frac{(-e)\mathbf{F}}{\hbar}t. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Pode-se considerar que uma banda (ver Fig. 9) é ocupada por apenas um elétron. Como a trajetória do elétron no espaço recíproco é dada pela Eq.(1.41), logo, em um espaço de tempo o elétron mudaria seu vetor de onda \mathbf{k} pela mesma quantidade. Assim, dado um intervalo de tempo longo, o elétron atravessaria no espaço recíproco toda a extensão da 1.^a zona de Brillouin até ser refletido, ou seja, o vetor \mathbf{k} vai de B' até A e de A até B , reaparecendo em B' . Agora, a velocidade dada pela Eq.(1.38), como ilustrado na Fig. 9 para uma rede unidimensional, em que ela é proporcional a $d\epsilon/dk$, e para essa rede $k(t) = k(0) - eFt/\hbar$, o eixo k pode ser interpretado como o eixo $-t$, ou seja, o movimento do elétron é oscilatório. Estes movimentos oscilatórios são conhecidos como oscilações de Bloch [5, 52, 53].

Supondo que o vetor \mathbf{k} esteja inicialmente em B' , então, $\mathbf{k}(0) = -\pi/a$ e definindo τ como o tempo gasto para realizar uma oscilação completa, ou seja, o tempo gasto para \mathbf{k} sair de B' e chegar a B , assim, a Eq.(1.41) é reescrita como:

$$\mathbf{k}(\tau) - \mathbf{k}(0) = \frac{(-e)\mathbf{F}}{\hbar}\tau \Rightarrow \frac{2\pi}{a} = \frac{(-e)F}{\hbar}\tau \Rightarrow \tau = \frac{2\pi\hbar}{(-e)Fa}. \quad (1.42)$$

Portanto, a frequência de oscilação é

$$\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \frac{(-e)Fa}{\hbar}, \quad (1.43)$$

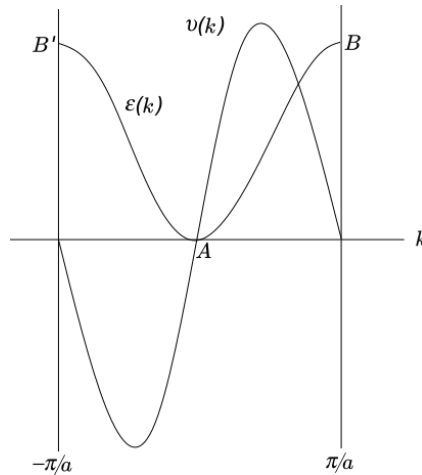


Figura 9. Dinâmica de um elétron em uma banda.

Fonte: Autor (2022).

onde F 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, é encontrado que

$$\omega = F, \quad (1.44)$$

que é a frequência das oscilações de Bloch, e são da ordem da intensidade do campo elétrico.

Na próxima seção, será considerado que os íons possuem mobilidade, logo, descrevendo melhor o que acontece na natureza.

1.6 Interação Elétron-Fônon

No modelo de Anderson [3] abordado na Seção (1.3), foi realizada uma descrição da dinâmica eletrônica em sistemas desordenados. Inicialmente, assumiu-se que os íons da rede não tinham mobilidade. No entanto, para uma descrição mais precisa dos fenômenos observados na natureza, é crucial incorporar o movimento dos íons. Ao considerar essa possibilidade, torna-se viável incluir os modos vibracionais da rede (fônons), e é necessário analisar o espalhamento da função de onda eletrônica por esses modos vibracionais. Muitos estudos que abordam a interação elétron-fônon empregam a aproximação adiabática, conhecida como aproximação de Born-Oppenheimer [54]. Essa aproximação pressupõe que as forças de interação entre elétrons e íons possuem a mesma magnitude, o que implica que a variação do momento linear de ambos está na mesma ordem de grandeza. Dessa forma, os íons da rede exibem uma certa mobilidade, ainda que muito inferior em comparação ao movimento dos elétrons [55, 56].

Conforme destacado por Kittel [2], a interação elétron-fônon está associada a uma quase-partícula conhecida como *polaron*. Em cristais iônicos, nos quais a estrutura

é composta por íons positivos e íons negativos, essa interação é mais intensa devido à forte interação coulombiana entre íons e elétrons. Por outro lado, em cristais covalentes, formados por átomos, essa interação é menos intensa devido à fraca interação entre os átomos neutros e os elétrons. Quando sistemas não-lineares são considerados, essa característica pode resultar em uma interação intensa entre elétrons e fônons, gerando mobilidade. Neste estudo, consideraremos que os íons realizam movimentos oscilatórios ao redor de suas posições de equilíbrio. Assim, o sistema elétron-rede pode ser descrito por um Hamiltoniano que compreende uma parte quântica, responsável pela dinâmica eletrônica, e uma parte clássica, referente aos fônons, conforme será detalhado na seção (1.8).

Na seção seguinte, será tratado a dinâmica eletrônica na presença de deformações da rede, mais especificamente as ondas acústicas de superfície e os sólitons.

1.7 Ondas Acústicas de Superfície (SAW) em sistemas com acoplamento elétron-rede

Em um trabalho pioneiro em 1885, uma descrição qualitativa das chamadas Ondas Acústicas de Superfície (SAW) foi realizada por Lord Rayleigh [22]. Demonstrou-se teoricamente que essas ondas podem propagar-se sobre um sólido elástico ou um meio suficientemente rarefeito. Trata-se de ondas mecânicas (acústicas) que se propagam em sólidos através das deformações no material, como a variação da distância entre os átomos. Quando essas ondas se propagam no material, cada átomo oscila em torno de sua posição de equilíbrio.

A dinâmica eletrônica na presença das SAW tem atraído interesse da comunidade científica. Foi investigado experimentalmente por He *et al.* [57] o transporte de elétrons correlacionados com o auxílio de SAW em canais quase-unidimensionais. Esses elétrons foram transportados através de três canais separados por microns formados em uma heteroestrutura. As SAW capturam os elétrons e os conduz para dois canais reduzidos conectados a um canal balístico aberto. Hermelin *et al.* [58] demonstrou experimentalmente usando uma fonte e detector de um único elétron se propagando isoladamente dos outros elétrons em um canal unidimensional. Este canal é colocado entre dois pontos quânticos, e um SAW transporta este elétron através do canal com uma velocidade $3\mu\text{m ns}^{-1}$. As eficiências de emissão e recepção são de 96% e 92%, respectivamente. Na pesquisa realizada por Miseikis *et al.* [59] foi feito um experimento em grafeno sob o efeito de (SAWs) em uma superfície piezoelétrica. Foi mostrado a existência de uma corrente acustoeletrônica atravessando a estrutura do grafeno.

Para entender melhor a dinâmica eletrônica mediada por ondas acústicas, é preciso compreender o conceito de sóliton, que se tratam de pulsos “isolados” que viajam através

da rede, por exemplo, com velocidade constante e tem a característica de manter a sua forma mesmo após uma colisão. Para realizar o transporte de cargas por meio de excitações solitônicas, é preciso adicionar o termo de acoplamento elétron-fônon no termo de energia *on-site* [60] ou no termo de *hopping* [16].

Prosseguindo com o arcabouço teórico necessário para compreender o trabalho a ser desenvolvido nesta tese, na próxima seção, será apresentado o conceito de redes não-lineares.

1.8 Redes Não-Lineares

Nesta seção, o objetivo é compreender as propriedades de redes não-lineares. Para isso, será apresentado dois potenciais, são eles: potencial FPU [17] e o potencial de Morse [18, 19, 20, 21]. O primeiro, trata do estudo de características vibracionais em redes não-lineares. As forças agindo entre sítios vizinhos em uma rede finita é descrita por termos quadráticos e cúbicos, que vem acompanhado por constantes que descrevem a intensidade da não-linearidade. O modelo FPU pode ser dividido em duas abordagens. (γ -FPU) que trata dos termos quadráticos e o (β -FPU) que corresponde aos termos cúbicos. O segundo modelo considera que os potenciais da rede são descritos por uma exponencial. Cada modelo será detalhado nas seguintes subseções.

1.8.1 Potenciais FPU

O modelo FPU consiste basicamente em estudar forças anarmônicas, assim, as abordagens γ -FPU e β -FPU podem ser retratados em uma série de potência, em que o truncamento acontecerá no termo cúbico, ou seja,

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 q_n}{dt^2} &= k(q_{n+1} - q_n) - k(q_n - q_{n-1}) \\ &+ \gamma[(q_{n+1} - q_n)^2 - (q_n - q_{n-1})^2] \\ &+ \beta[(q_{n+1} - q_n)^3 - (q_n - q_{n-1})^3], \end{aligned} \quad (1.45)$$

onde q_n representa a posição no sítio n , k_n é a constante clássica da mola, γ e β são constantes de não-linearidade. Fermi *et al.* [17] realizaram um estudo para entender o efeito de incluir termos não-lineares à força entre partículas em uma rede unidimensional. Foram estudados potenciais com termos cúbicos e quárticos, que para uma rede unidimensional com N sítios são dados por:

$$U_{\gamma-FPU} = \frac{k}{2}(j_n^2 + j_{n-1}^2) + \frac{\gamma}{3}(j_n^3 + j_{n-1}^3), \quad (1.46)$$

e,

$$U_{\beta-FPU} = \frac{k}{2}(j_n^2 + j_{n-1}^2) + \frac{\beta}{4}(j_n^4 + j_{n-1}^4), \quad (1.47)$$

onde $j_n = q_{n+1} - q_n$. Com o uso do formalismo de Hamilton, o Hamiltoniano para essa rede é dado por:

$$\begin{aligned}
H_{FPU} = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m} &+ \frac{k}{4} \sum_{n=1}^N [(q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2] \\
&+ \frac{\gamma}{6} \sum_{n=1}^N [(q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3] \\
&+ \frac{\beta}{8} \sum_{n=1}^N [(q_{n+1} - q_n)^4 + (q_n - q_{n-1})^4], \tag{1.48}
\end{aligned}$$

no qual p_n é o momento linear causado devido às vibrações atômicas, γ e β são constantes de não-linearidades cúbica e quártica, respectivamente. Com a análise dos termos, é possível notar que os fatores são normalizados na energia potencial, ou seja, $1/4$, $1/6$ e $1/8$, sendo obtidos dividindo os fatores que multiplicam as energias harmônicas, cúbicas e quárticas por 2 (dois). Isso foi feito para evitar que a energia potencial por massa seja contada duas vezes devido ao somatório. Assim, com o uso das equações de Hamilton, têm-se

$$\begin{aligned}
\dot{q}_n &= \frac{\partial H_{FPU}}{\partial p_n} = \frac{p_n}{m}; \tag{1.49} \\
\dot{p}_n &= -\frac{\partial H_{FPU}}{\partial q_n}; \\
m \frac{d^2 q_n}{dt^2} &= k[(q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1})] \\
&+ \gamma[(q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2] \\
&+ \beta[(q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3]. \tag{1.50}
\end{aligned}$$

Portanto, as equações clássicas que ditam a dinâmica das vibrações da rede não-linear são obtidas, isto é, descrevem o comportamento dos fônons. Agora, para estudar a dinâmica de um elétron nessa rede não-linear deve-se ter um Hamiltoniano completo na forma $H = H_{ele} + H_{rede}$, no qual, o Hamiltoniano da rede será dado pelo modelo FPU (H_{FPU}). O Hamiltoniano *tight-binding* eletrônico unidimensional é:

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N \epsilon_n c_n^\dagger c_n + \sum_{n=1}^N T_{n+1,n} (c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}), \tag{1.51}$$

onde o *hopping* é $T_{n+1,n} = T_0 e^{-\alpha(q_{n+1} - q_n)}$. Aqui, se tem um sistema com acoplamento elétron-rede, no qual, α é o termo responsável por esse acoplamento.

Com a operação de H nas funções de Wannier ($|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$), é possível escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo e também chegar as equações que descrevem o comportamento das vibrações da rede em um sistema com acoplamento elétron-rede, isto é,

$$i\hbar \frac{df_n(t)}{dt} = \epsilon_n f_n(t) + T_0 e^{-\alpha(q_{n+1} - q_n)} f_{n+1}(t) + T_0 e^{-\alpha(q_n - q_{n-1})} f_{n-1}(t); \tag{1.52}$$

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2 q_n}{dt^2} &= k(q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) \\
&+ \gamma[(q_{n+1} - q_n)^2 - (q_n - q_{n-1})^2] \\
&+ \beta[(q_{n+1} - q_n)^3 - (q_n - q_{n-1})^3] \\
&+ \alpha[e^{-\alpha(q_{n+1}-q_n)}(f_{n+1}^\dagger f_n + f_{n+1} f_n^\dagger) \\
&- e^{-\alpha(q_n-q_{n-1})}(f_n^\dagger f_{n-1} + f_n f_{n-1}^\dagger)].
\end{aligned} \tag{1.53}$$

1.8.2 Potenciais de Morse

Na literatura existem abordagens envolvendo potenciais anarmônicos descritos por exponenciais, uns dos mais conhecidos e usados é o de Morse [18], sendo descrito da seguinte maneira:

$$U_{Morse}(q_n) = D e^{-2a(q_n - q_{n-1})} - 2D e^{-a(q_n - q_{n-1})}, \tag{1.54}$$

onde D e a são a profundidade e largura do potencial, respectivamente. O potencial de Morse é muito utilizado em pesquisa envolvendo interações interatômicas e também seus comportamentos vibracionais [61]. Como feito na subseção anterior (1.8.1), ambos os potenciais podem ser representados usando o formalismo de Hamilton, que para uma rede unidimensional com N sítios para o potencial de Morse é dada por:

$$H_{Morse} = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m} + \sum_{n=1}^N U_{Morse}(q_n). \tag{1.55}$$

Novamente com o uso das equações de Hamilton, as equações de movimento para esse potencial são:

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2 q_n}{dt^2} &= Da[(2 - e^{-a(q_{n+1}-q_n)})e^{-a(q_{n+1}-q_n)} \\
&- [2 - e^{-a(q_n-q_{n-1})}]e^{-a(q_n-q_{n-1})}].
\end{aligned} \tag{1.56}$$

Progredindo com a mesma análise da subseção anterior, um elétron é adicionado a uma rede não-linear que obedece ao potencial de Morse, logo, o Hamiltoniano completo é $H = H_{ele} + H_{Morse}$, assim, mais uma vez com o uso das equações de Hamilton, as equações que ditam a dinâmica clássica são obtidas,

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2 f_n}{dt^2} &= Da[(2 - e^{-a(q_{n+1}-q_n)})e^{-a(q_{n+1}-q_n)} \\
&- [2 - e^{-a(q_n-q_{n-1})}]e^{-a(q_n-q_{n-1})}] \\
&+ \alpha T_0[(f_{n+1}^\dagger f_n + f_{n+1} f_n^\dagger) - (f_n^\dagger f_{n-1} + f_n f_{n-1}^\dagger)].
\end{aligned} \tag{1.57}$$

1.9 Ferromagnetismo

Materiais ferromagnéticos são reconhecidos por apresentarem magnetização mesmo na ausência de campo magnético, fenômeno conhecido como magnetização espontânea. Ao

contrário dos materiais paramagnéticos, nos quais a magnetização surge apenas na presença de um campo magnético, os materiais ferromagnéticos foram objeto de investigação por Pierre Curie no século XIX, enquanto ele explorava a magnetização em relação à temperatura. A pesquisa revelou que substâncias ferromagnéticas exibem uma temperatura crítica, chamada temperatura de Curie, acima da qual perdem seu comportamento ferromagnético. Em 1907, Weiss [62] propôs a existência de um campo molecular originado da interação entre elétrons, os quais tendem a alinhar seus momentos magnéticos. Para temperaturas abaixo da temperatura de Curie, o efeito do campo molecular supera as flutuações térmicas, permitindo que o material exiba comportamento ferromagnético.

Independentemente, Heisenberg [63, 64] e Dirac [65, 66] demonstraram que a origem do campo molecular proposto por Weiss residia em uma interação de troca (*exchange*) entre os *spins* dos elétrons. Essa interação de *exchange*, de natureza quântica, explica a interação coletiva entre os momentos magnéticos, sendo responsável pelo ordenamento magnético. Nas subseções subsequentes, será fornecido um detalhamento sobre o conceito de *spin* e o modelo de Heisenberg aplicado a materiais ferromagnéticos.

1.9.1 Spin

A existência do *spin*² do elétron foi proposto para explicar os resultados obtidos no experimento de Stern-Gerlach, o mesmo foi proposto em 1922 por Otto Stern e Walter Gerlach, onde foram feitas medidas do momento magnético de átomos de prata. Considerando que um forno emite átomos de prata em direção a uma região onde há um campo magnético não uniforme, como descrito na Fig. 10 a).

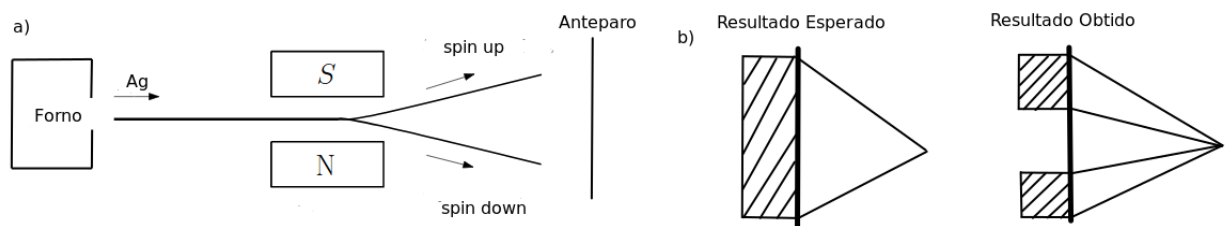


Figura 10. a) Esboço do experimento de Stern-Gerlach; b) Resultado experimental que Stern e Gerlach esperavam obter e o resultado obtido. A teoria clássica verificava que o feixe deveria ser espalhado verticalmente de forma contínua.

Fonte: Autor (2023).

Ao passar pelo campo magnético, os átomos são defletidos, pela Mecânica Clássica os átomos vão apresentar momento angular \mathbf{L} e o momento magnético é dado por

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{L}, \quad (1.58)$$

² Um momento angular “intrínseco”, em que não é possível escrevê-lo em termos das coordenadas da partícula e dos componentes do momento linear.

onde γ é uma constante denominada de razão giromagnética³. Supondo que o campo magnético está orientado na direção z , a ação de uma força magnética sobre os átomos é dada por:

$$\mathbf{F}_m = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}). \quad (1.59)$$

Por outro lado, vai ter a ação de um torque magnético $\boldsymbol{\tau}_m$, tal que

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \boldsymbol{\tau}_m = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \rightarrow \frac{d\mathbf{L}}{dt} = \gamma \mathbf{L} \times \mathbf{B}. \quad (1.60)$$

A taxa de variação de \mathbf{L} é perpendicular ao próprio \mathbf{L} e \mathbf{B} . Logo, a componente \mathbf{L} paralela a \mathbf{B} é constante. Assim,

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_m = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) &= \nabla(\mu_z B_z) \\ F_z &= \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = \gamma L_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.61)$$

Esta força faz a deflexão dos átomos de prata. Como o momento angular \mathbf{L} deve apresentar um valor contínuo, espera-se que haja uma distribuição contínua dos átomos, como ilustrado na Fig. 10 b). Os resultados do experimento de Stern-Gerlach mostraram que os átomos atingiram o anteparo em duas regiões simétricas em relação ao feixe incidente (ver Fig. 10 b)). Isso mostra que o momento magnético dos átomos não pode estar associado ao momento angular orbital clássico $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, visto que este deve possuir uma distribuição contínua para a componente L_z , centrada em $L_z = 0$. Neste caso, os átomos de prata possuem um momento intrínseco \mathbf{S} , em que as componentes apresentam distribuição discreta.

O *spin* do elétron é um momento angular que existe independentemente do estado de movimento no qual a partícula se encontra. O número quântico do *spin* s para o elétron é igual a $1/2$. O módulo do *spin* é igual a

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (1.62)$$

O operador de *spin* \mathbf{S}^2 é definido como:

$$\mathbf{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2. \quad (1.63)$$

Suponha que um vetor de estado $|\psi\rangle$ seja autovetor de \mathbf{S}^2 , com

$$\mathbf{S}^2 |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle. \quad (1.64)$$

Como $[\mathbf{S}^2, S_z] = 0$, deve-se escrever uma base de autovetores de \mathbf{S}^2 e S_z da seguinte forma:

$$\mathbf{S}^2 |k, s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |k, s, m\rangle; \quad (1.65)$$

³ O módulo do coeficiente de proporcionalidade entre o momento angular e o momento magnético

$$S_z |k, s, m\rangle = m\hbar |k, s, m\rangle, \quad (1.66)$$

onde o vetor de estado $|k, s, m\rangle$ é um vetor de estado na base S_z , k retrata a energia cinética da partícula e m é denominado de número do momento magnético e está associado a componente do *spin* no eixo z . Se s for inteiro (bósons), todos os valores de m serão inteiros; caso s seja semi-inteiro (férmions) todos os valores de m serão semi-inteiros. Os valores de m para um dado s são:

$$m = \underbrace{-s, s+1, \dots, s-1}_{2s+1 \text{ estados}}, \quad (1.67)$$

ou seja, para cada valor de s existem $2s+1$ estados de m . Outros operadores que se deve dá a devida atenção são S_+ e S_- , denominados de operadores de levantamento e abaixamento, respectivamente. Esses operadores aplicados ao estado $|k, j, m\rangle$ resultam em

$$S_+ |k, j, m\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m+1)} |k, j, m+1\rangle; \quad (1.68)$$

$$S_- |k, j, m\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m-1)} |k, j, m-1\rangle, \quad (1.69)$$

no qual, são definidos a partir de $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$, onde S_x e S_y são as componentes x e y do operador de *spin*.

1.9.2 Mágnon e Modelo de Heisenberg

Considerando uma substância ferromagnética em seu estado fundamental, se uma perturbação for aplicada a um dos seus *spins*, isso resultará em uma perturbação coletiva de todos os *spins* do sistema. Essa perturbação é conhecida como ondas de *spin*, e sua quantização é referida como mágnon. Os mágns são quase-partículas formadas por excitações coletivas em materiais magnéticos. Bloch [67] formulou esse conceito para elucidar a redução da magnetização espontânea em materiais ferromagnéticos.

Para fornecer uma descrição mais detalhada das ondas de *spin*, a formulação do modelo de Heisenberg para mágns em sistemas ferromagnéticos será apresentada a seguir. Considera-se um sistema de dois elétrons que interagem através do potencial

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (1.70)$$

onde $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, que se trata da distância entre os elétrons. Como cada elétron deve ser representado por sua respectiva função de onda, então, para se escrever uma função de onda para o sistema é preciso ter uma combinação linear das funções de onda dos elétrons A e B , ou seja,

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2) \pm \phi_A(\mathbf{r}_2)\phi_B(\mathbf{r}_1)]. \quad (1.71)$$

Calculando o valor esperado da energia através da relação

$$\epsilon = \int \Psi_{\pm}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) U \Psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \quad (1.72)$$

Lembrando que as partículas são idênticas e a interação entre elas independem do *spin*, assim, a função de onda só depende das coordenadas espaciais. Dito isso, substituindo (1.70) e (1.71) em (1.72), tem-se

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left[\int \phi_A^*(\mathbf{r}_1) \phi_B^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_B(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right. \\ &\quad \pm \int \phi_A^*(\mathbf{r}_1) \phi_B^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \\ &\quad \pm \int \phi_A^*(\mathbf{r}_2) \phi_B^*(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_B(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \\ &\quad \left. \pm \int \phi_A^*(\mathbf{r}_2) \phi_B^*(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right]; \\ \epsilon &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\int \phi_A^*(\mathbf{r}_1) \phi_B^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_B(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right. \\ &\quad \left. \pm \int \phi_A^*(\mathbf{r}_1) \phi_B^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right]. \end{aligned} \quad (1.73)$$

A partir da Eq.(1.73), pode-se definir E como a energia média do sistema e J_{TROCA} a interação de troca (*exchange*) da seguinte forma

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\int \phi_A^*(\mathbf{r}_1) \phi_B^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_1) \phi_B(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right]; \quad (1.74)$$

$$J_{TROCA} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\int \phi_A^*(\mathbf{r}_1) \phi_B^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(\mathbf{r}_2) \phi_B(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right], \quad (1.75)$$

logo, o valor esperado da energia é dado por

$$\epsilon = E \pm J_{TROCA}. \quad (1.76)$$

A escolha do sinal na Eq.(1.76) depende do estado dos *spins*, ou melhor, se o estado é singlete ($s = 0$) ou triplete ($s = 1$). Estes estados podem ser organizados como

$$|\phi_t\rangle = \begin{cases} |s = 1, m = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \\ |s = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]; \\ |s = 1, m = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \end{cases} \quad (1.77)$$

$$|\phi_s\rangle = \begin{cases} |s = 0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle], \end{cases} \quad (1.78)$$

onde o conjunto de estados $\{|\uparrow\uparrow\rangle\}$ simboliza os estados dos dois elétrons no espaço dos *spins* e cada seta representa um elétron. Assim, o valor esperado da energia depende se o

estado é singlete ou tripleto, com isso, ϵ deve ser escrito em termos de \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 . Partindo da relação

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (1.79)$$

Aplicando o operador \mathbf{S}^2 da Eq.(1.79) no estado $|k, s, m\rangle$, obtém-se

$$\mathbf{S}^2 |k, s, m\rangle = \mathbf{S}_1^2 |k, s, m\rangle + \mathbf{S}_2^2 |k, s, m\rangle + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 |k, s, m\rangle. \quad (1.80)$$

Fazendo uso da Eq.(1.65), sabendo que os autovalores de \mathbf{S}_1^2 e \mathbf{S}_2^2 são $1/2(1/2+1)\hbar^2 = 3\hbar^2/4$. Por fim, deve-se aplicar $\langle k, s, m|$ em ambos os lados da Eq.(1.80), logo,

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{s(s+1)\hbar^2}{2} - \frac{3}{4}\hbar^2 = \begin{cases} -3\hbar^2/4, & \text{se } s = 0 \text{ (singlete);} \\ \hbar^2/4, & \text{se } s = 1 \text{ (tripleto).} \end{cases} \quad (1.81)$$

Portanto, a Eq.(1.76) pode ser reescrita como

$$\epsilon = E \pm J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (1.82)$$

Definindo E como o referencial de energia, o Hamiltoniano de Heisenberg que descreve a possibilidade de dois elétrons trocarem de estados é dado por

$$H = -J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (1.83)$$

no qual, J se trata da constante de troca que descreve a interação de troca de *spins* em um cristal, e estes *spins* interagem aos pares.

Supondo que os elétrons da camada de valência estejam suficientemente localizados, de tal forma que se possa associar um *spin* a cada átomo, ou seja, é considerado uma rede linear com N íons. O Hamiltoniano que prevê a interação entre os *spins* destes íons é dado pela seguinte equação:

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.84)$$

onde $J_{i,j}$ é a constante de troca *exchange*, \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_j são operadores de *spin* que atuam nos sítios i e j , respectivamente. Se os *spins* de uma rede de N íons estiverem alinhados paralelamente uns aos outros, tem-se o chamado ordenamento ferromagnético, e por consequência disso a constante de troca deve ser positiva. Se os *spins* estiverem alinhados antiparalelamente uns aos outros, chama-se de ordenamento antiferromagnético, e a constante de troca deve ser negativa.

Nas próxima seção será apresentado a fundamentação teórica referente ao trabalho desenvolvido no Cap.5.

1.10 Informação Quântica

1.10.1 Qubit

O *bit* (abreviação de *binary digit*) representa o conceito fundamental na informação e computação clássica, podendo assumir valores de 0 ou 1. Com o avanço da mecânica quântica, surgiu o equivalente quântico, conhecido como *qubit* (abreviação de *quantum bit*). Sistemas quânticos de dois níveis, como o elétron com *spin* 1/2, podem ser representados por *qubits*. Os dois estados possíveis do *spin* do elétron, *spin up* representado por $|0\rangle$ e *spin down* representado por $|1\rangle$, permitem expressar o *qubit* como uma combinação linear dos vetores base $|0\rangle$ e $|1\rangle$ [68], ou seja,

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (1.85)$$

onde α e β são números complexos normalizados que satisfazem a relação $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Os coeficientes α e β da expansão do estado $|\psi\rangle$ com respeito à base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ são as probabilidades de obter o resultado correspondente a 0 dada por $|\alpha|^2$, e a 1 dado por $|\beta|^2$. A Eq.(1.85) significa que o *qubit* é uma superposição dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ no mesmo instante de tempo. Este é um efeito tipicamente quântico, ou seja, não possui análogo clássico. Se uma medida for realizada, pode-se encontrar o *qubit* no estado $|0\rangle$ com probabilidade $|\alpha|^2$ ou no estado $|1\rangle$ com probabilidade $|\beta|^2$. Diferentemente do *bit* clássico que só pode assumir no mesmo instante de tempo os valores 0 ou 1.

Para se ter uma representação geométrica do *qubit*, pode-se tomar $\alpha = \cos(\theta/2)$ e $\beta = e^{i\phi}\sin(\theta/2)$, com isso, é possível reescrever a Eq.(1.85) da seguinte maneira

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad (1.86)$$

no qual θ e ϕ são números reais e definem um ponto na esfera de Bloch, como ilustrado na Fig. 11. Com θ e ϕ variando entre $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$, respectivamente. É possível

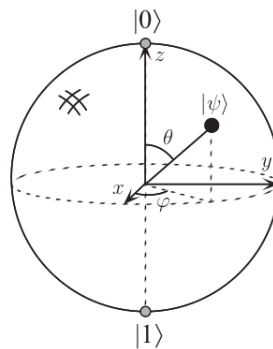


Figura 11. Representação da esfera de Bloch de um *qubit*.

Fonte: Nielsen *et al.* (2010) [68].

escrever os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, tomando $\theta = 0$ e $\theta = \pi$ na Eq.(1.86).

1.10.2 Transferência de Estados Quânticos

A proposta de transferência de estados quânticos (*QST - Quantum State Transfer*) ao longo de uma cadeia de *spins* foi apresentada por Bose [29]. O autor sugeriu a preparação de um estado em uma das extremidades de uma rede unidimensional de *spins* sob a influência de um campo magnético constante. O objetivo é transmitir esse estado para a outra extremidade com certa fidelidade, considerando que a interação entre os *spins* ocorre apenas entre primeiros vizinhos.

Para compreender o protocolo *QST*, o restante da subseção será baseada nas referências [29, 69]. O Hamiltoniano que descreve o sistema proposto por Bose (ver Fig. 12 (b)) é dado por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \boldsymbol{\sigma}^i \boldsymbol{\sigma}^j - \sum_{i=1}^N B_i \sigma_z^i, \quad (1.87)$$

onde $\langle i, j \rangle$ simbolizam os pares de *spins*, $J_{i,j}$ é o termo de interação entre os *spins*, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli e B é o campo magnético. Esse sistema deve está no estado fundamental, ou seja, todos os *spins* estão alinhados paralelamente na direção $-z$, e matematicamente podem ser expressos por $|\mathbf{0}\rangle = |000\dots 0\rangle$, onde $|\mathbf{0}\rangle$ denota o estado do *spin* no estado fundamental (ver Fig. 12 (a)). É escolhido que $J_{ij} < 0$, isso significa que a cadeia de *spin* descreve um ferromagneto, ou seja, o estado fundamental nesse tipo de material na presença de um campo magnético é aquele onde todos os *spins* estão apontados na direção do campo. Para que se chegue a configuração desejada, a temperatura do sistema deve ser diminuída. No protocolo *QST*, na extremidade esquerda da rede se tem a fonte (Alice) que prepara um estado de entrada arbitrário da forma $|\mathbf{j}\rangle = |00\dots 010\dots 0\rangle$, onde $\mathbf{j} = \mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \mathbf{s}, \dots, \mathbf{r}, \dots, \mathbf{N}$, em que o *spin* do j -ésimo sítio foi flipado para $|1\rangle$, enquanto todos os outros *spins* estão no estado fundamental. Devido a evolução natural da rede, esse estado de propaga para o restante dos *spins*. Devido a isso, o receptor (Bob) adquire um estado que varia com o tempo. Para finalizar o protocolo de comunicação, Bob espera o momento ideal para receber o estado enviado por Alice, ou seja, ele espera um intervalo de tempo tão longo quanto ele possa esperar. Isso garante que é escolhido o momento ideal para que o estado de *spin* no final da rede seja o mais próximo possível daquele que Alice pretendia transmitir.

Uma medida bastante utilizada para verificar a eficiência da *QST* é a fidelidade, ela mede o quanto o estado quântico preparado por Alice é recebido por Bob. Para deduzir essa medida é necessário supor que o estado preparado por Alice é representado por $|\psi_{in}\rangle$ e que o estado de *spin* que Bob mede no momento ideal t_0 é representado pelo operador densidade $\rho_{out}(t_0)$, devido a isso, existe a possibilidade de que o estado de saída possa ser misto. A fidelidade é definida por

$$F = \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle, \quad (1.88)$$

no qual essa medida está sempre entre 0 e 1. O valor 1 significa uma transferência perfeita.

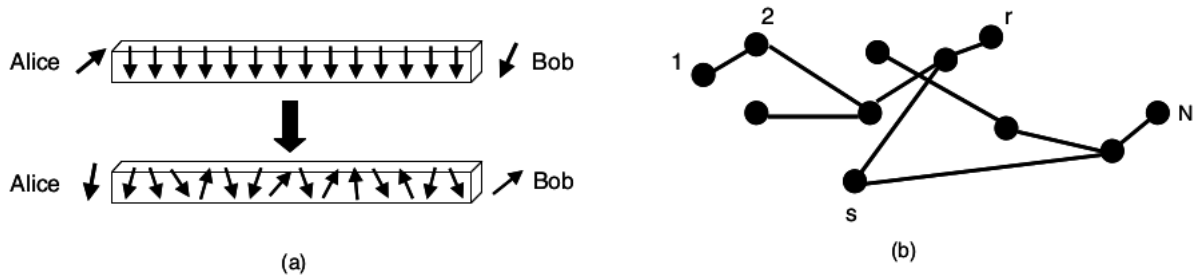


Figura 12. (a) Esquemática para uma rede de *spins* unidimensional em um campo magnético externo; (b) Canal arbitrário em uma rede com N *spins*, onde os vértices simbolizam os *spins* e as arestas representam as interações entre os *spins* interagentes.

Fonte: Bose (2003) [29].

Para generalizar a Eq.(1.88), deve-se assumir que a fonte s está no início da rede e um receptor r se encontra situado no final da rede. O restante da cadeia é chamada de canais de *spins*. No tempo $t = 0$ Alice coloca na fonte o estado que deseja transmitir para Bob, no qual esse estado de entrada $|\psi_{in}\rangle$ pode ser representado pela Eq.(1.86). Portanto, nesse instante de tempo o estado da rede é

$$|\Psi(0)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{s}\rangle. \quad (1.89)$$

Feito isso, é preciso esperar que o estado inicial evolua para um estado final mais próximo possível de

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{r}\rangle. \quad (1.90)$$

A interação de troca entre os *spins* é feita de um sítio para o seu vizinho mais próximo, ou seja, sai de $|00\dots 01_x 0_{x+1} \dots 0\rangle$ e vai para $|00\dots 00_x 1_{x+1} \dots 0\rangle$, assim, considera-se que o número total de excitação é mantido. Dito isso, tem-se que o operador da componente z total dos *spins* ($\sum_{i=1}^N \sigma_z^i$) comuta com o Hamiltoniano H , matematicamente descrito por $[H, \sum_{i=1}^N \sigma_z^i] = 0$, isso significa que essa componente é conservada. Logo, indicando que o estado $|\mathbf{s}\rangle$ deverá evoluir como uma superposição dos estados $|\mathbf{j}\rangle$, assim,

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sum_{j=1}^N \langle \mathbf{j} | e^{-iHt} | \mathbf{s} \rangle |\mathbf{j}\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mathbf{0}\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sum_{j=1}^N f_{j,s}(t) |\mathbf{j}\rangle, \end{aligned} \quad (1.91)$$

onde $f_{j,s}(t) = \langle \mathbf{j} | e^{-iHt} | \mathbf{s} \rangle$ é definido como a amplitude de transição do j -ésimo para o s -ésimo sítio. Em geral, o estado receptor é misto, ou seja, é descrito por um conjunto de

estados puros $\{|\psi_j\rangle\}$, associado cada um a uma probabilidade p_j , de modo que $\sum_j p_j = 1$. O operador densidade⁴ [70], também conhecido como matriz densidade, associado a esse estado misto é definido como

$$\rho = p_j \sum_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j|. \quad (1.92)$$

Em particular, para um estado puro, no qual $|\psi\rangle$ é conhecido com exatidão, o operador densidade é dado por

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi|. \quad (1.93)$$

O estado do r -ésimo *spin* pode ser obtido através do traço parcial dos estados de todos os outros *spins* a partir de $\rho_{out} = Tr_{1,2,\dots,N-1}(|\Psi(t)\rangle \langle\Psi(t)|)$. Segundo Nielsen *et al.* [68] a razão para fazer isso é porque a operação de traço parcial é a única operação que dá origem à descrição correta de quantidades observáveis para subsistemas de um sistema composto. Logo, ρ_{out} evolui no tempo conforme a relação

$$\rho_{out}(t) = P(t) |\psi_{out}(t)\rangle \langle\psi_{out}(t)| + (1 - P(t)) |0\rangle \langle 0|, \quad (1.94)$$

com

$$|\psi_{out}(t)\rangle = \frac{1}{[P(t)]^{1/2}} \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{s,r}(t) |1\rangle \right), \quad (1.95)$$

onde

$$P(t) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}(t)|^2. \quad (1.96)$$

Agora, suponha que seja decidido que Bob irá captar o r -ésimo *spin* (e, portanto, completar o protocolo de comunicação) num tempo determinado $t = t_0$. A fidelidade da comunicação quântica através do canal é calculada em média sobre todos os estados de entrada puros na esfera de Bloch

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \langle\psi_{in}|\rho_{out}(t_0)|\psi_{in}\rangle d\Omega, \quad (1.97)$$

onde $|\psi_{in}\rangle$ são os estados de entrada. Depois de alguns cálculos (que podem ser encontrados no Apêndice A) é possível chegar na relação

$$F(t) = \frac{1}{2} + \frac{|f_N(t)|}{3} + \frac{|f_N(t)|^2}{6}, \quad (1.98)$$

no qual $f_N(t)$ é a amplitude de transição da excitação do primeiro ao último *spin*. Note que se $f_N(t) = 1$ resulta em $F(t) = 1$, ou seja, a *QST* é perfeita. Utilizando o protocolo *QST*, Bose [29] verificou que a fidelidade é máxima para $N = 2$ e 4. Quase perfeita para $N = 8$, obtendo uma fidelidade em torno de $F = 0.994$. E acima de 90% para $N = 7, 10, 11, 13$ e 14.

⁴ O operador densidade descreve o estado estatístico de um sistema quântico e foi criado por J. von Neumann em 1927.

1.10.3 Emaranhamento

Emaranhamento é definido como a propriedade de correlações entre dois ou mais sistemas quânticos [71, 72], ou seja, não é possível descrever independentemente um sistema quântico de outro, então os sistemas estão emaranhados. Se considerarmos dois *bits* clássicos, eles podem assumir os seguintes valores: 00, 01, 10 e 11. Agora, para dois *qubits* é considerado o espaço gerado por $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Então, qualquer estado de dois *qubits* pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle, \quad (1.99)$$

onde α, β, γ e δ são as amplitudes de probabilidade de obter o par ij . Considerando o estado $|\psi_{-}\rangle = 1/\sqrt{2}[|01\rangle - |10\rangle]$, se este estado for emaranhado, não se pode escrever na forma

$$|\psi_{-}\rangle = |v\rangle \otimes |w\rangle. \quad (1.100)$$

Tomando $|v\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ e $|w\rangle = \gamma |0\rangle + \delta |1\rangle$, logo,

$$\begin{aligned} |\psi_{-}\rangle &= |v\rangle \otimes |w\rangle \\ &= [\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle] \otimes [\gamma |0\rangle + \delta |1\rangle] \\ &= \alpha\gamma |00\rangle + \alpha\delta |01\rangle + \beta\gamma |10\rangle + \beta\delta |11\rangle. \end{aligned} \quad (1.101)$$

Assim, fazendo uma comparação de $|\psi_{-}\rangle$ com o resultado obtido na Eq.(1.101), é encontrado que $\alpha\gamma = 0$, $\alpha\delta = 1/\sqrt{2}$, $\beta\gamma = -1/\sqrt{2}$ e $\beta\delta = 0$, o que se trata de uma contradição já que ao menos um dos coeficientes seja nulo. Portanto, $|\psi_{-}\rangle$ é um estado emaranhado e esse estado faz parte de um conjunto de estados emaranhados conhecidos como estados de Bell [71, 73], são eles:

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|01\rangle \pm |10\rangle] \quad (1.102)$$

e

$$|\phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|00\rangle \pm |11\rangle]. \quad (1.103)$$

Uma aplicação muito conhecida para estados emaranhados é o teleporte quântico [74]. Por exemplo, caso se queria enviar um estado quântico qualquer de A para B, e para fazer isso é necessário um par de partículas emaranhadas e um canal de comunicação clássico. Em A é realizada uma medida no *qubit* a ser enviado e na partícula emaranhada e os projeta em um dos estados de Bell. Feito isso, A comunica a B classicamente o resultado, logo, B pode recuperar o estado que A preparou.

1.10.4 Concorrência

Para quantificar o emaranhamento do sistema mais simples possível como de dois *qubits* não é uma tarefa fácil, assim, será discutido o quantificador chamado concorrência. Para assimilar esse conceito, a presente subseção será desenvolvida seguindo a referência [75]. Tomando um estado qualquer $|\psi\rangle$, é possível escrevê-lo como uma combinação linear dos vetores da base $\{|i\rangle\}$, ou seja, $|\psi\rangle = \sum_i f_i |i\rangle$, onde f_i são as amplitudes de probabilidade. Com isso, o operador densidade ρ pode ser escrito como

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi| = \sum_i \sum_j f_i f_j^* |i\rangle \langle j|. \quad (1.104)$$

Com o objetivo de medir o emaranhamento entre um par de *qubits*, e fazendo uso da base computacional $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ deve-se escrever o operador densidade reduzido ρ para tal. Assim,

$$\rho = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & d & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.105)$$

onde $a = 1 - |f_i|^2 - |f_j|^2$, $b = |f_i|^2$, $c = f_i f_j^*$, $d = f_i^* f_j$ e $e = |f_j|^2$. Portanto, a concorrência para um estado misto bipartido é

$$C(\rho) = \max \{0, (\lambda_4 - \lambda_3 - \lambda_2 - \lambda_1)\}, \quad (1.106)$$

onde os λ_i são os autovalores em ordem decrescente da matriz Hermitiana $R \equiv \sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}$. Uma forma alternativa de encontrar esses mesmo autovalores é dizer que os λ_i são as raízes quadradas dos autovalores da matriz não-Hermitiana $\tilde{\rho}$, no qual

$$\tilde{\rho} = (\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (1.107)$$

σ^y é a componente y das matrizes de Pauli e ρ^* é o complexo conjugado na matriz ρ . O cálculo de $\tilde{\rho}$, da matriz $\tilde{\rho}$ e dos seus respectivos autovalores podem ser encontrados no Apêndice B. Portanto, tirando a raiz quadrada de λ_4 da Eq.(B.8) a expressão para a concorrência é dada por

$$C(\rho) = 2|f_i||f_j|, \quad (1.108)$$

no qual C varia de 0 a 1, de modo que se pode tomar a concorrência como uma medida de emaranhamento por si só.

2 Sistema de Dois Elétrons em uma Rede Cristalina

2.1 Introdução

Em um sistema que envolve interação elétron-elétron, ocorre uma competição entre o termo cinético (*hopping*) e o termo potencial. O *hopping* refere-se à dinâmica dos elétrons entre os átomos vizinhos, enquanto o segundo termo representa a interação Coulombiana entre eles [4]. Em contextos de modelos teóricos, essa interação entre elétrons pode ser incorporada por um modelo matemático que permite a dupla ocupação eletrônica em um átomo dado (ou sítio na rede topológica). Com a possibilidade de tal dupla ocupação, acompanhada de *spins* opostos, uma repulsão Coulombiana local entre eles é considerada. Este modelo foi extensivamente estudado, notavelmente pelo físico John Hubbard. O modelo de Hubbard original aborda o problema com um grande número de elétrons, mas pode ser adaptado para lidar com poucos elétrons (por exemplo, dois); o modelo de Hubbard para dois elétrons com *spins* opostos tem sido amplamente explorado na literatura, pois oferece uma compreensão simplificada de alguns aspectos relacionados à interação elétron-elétron local. De maneira geral, o papel da interação Coulombiana é intuitivamente simples de entender: se o custo energético associado à dupla ocupação for significativamente alto, a ponto de inibir a propagação do elétron na rede, o sistema geralmente exibe um comportamento isolante, também conhecido como isolante de Mott [76]. Caso o sistema contenha desordens, como elementos distintos na rede ou irregularidades espaciais, surgirão barreiras de potencial que modificarão as reflexões da onda eletrônica entre elas. Isso resultará em interferências construtivas e destrutivas, levando à localização da função de onda em uma região finita da rede. Conseqüentemente, os estados eletrônicos estarão localizados, e o sólido apresentará um caráter isolante, fenômeno conhecido como isolante de Anderson [37].

Foi demonstrado que a interação do tipo Hubbard entre elétrons em um sistema unidimensional com potencial aleatório exerce uma influência não monotônica no fenômeno de localização de Anderson [77]. Shepelyansky [78] esclareceu que os estados ligados de duas partículas interagentes são responsáveis pelo enfraquecimento da localização de Anderson, além de provocarem o dobramento da frequência das oscilações de Bloch [79, 80]. Um estudo específico sobre o dobramento da frequência das oscilações de Bloch em um sistema de dois elétrons em uma rede unidimensional sob a influência de um campo elétrico foi conduzido por Dias *et al.* [81]. Observou-se que, para uma condição inicial em que os elétrons estão inicialmente próximos, é possível detectar o dobramento da frequência.

Em estudos recentes sobre o sistema de dois elétrons, examinou-se a dinâmica de emaranhamento em uma caminhada quântica dissipativa [82]. Em outra investigação, analisou-se o impacto da interação harmônica entre elétrons nas propriedades termodinâmicas de um ponto quântico¹ [83].

No estudo conduzido por Loos *et al.* [84], foi realizado o cálculo da energia de correlação de alta densidade em sistemas de dois elétrons na superfície de uma esfera e também confinados em uma caixa esférica. A análise abordou a dinâmica de dois elétrons interagentes movendo-se em uma rede unidimensional, onde as interações ocorrem localmente e entre primeiros vizinhos. Os resultados revelaram que as interações locais desempenham um papel na dinâmica correlacionada, enquanto as interações entre primeiros vizinhos induzem uma caminhada quântica [85].

Foi conduzido um experimento que segue o modelo de Harper-Hofstadter para descrever partículas móveis de forma coerente confinadas em uma rede na presença de um campo magnético. No caso de duas partículas, as interações entre elas alteram o autoespectro, resultando em estados espalhados e ligados. Essas interações quebram a simetria entre as partículas, proporcionando um caminho para o preenchimento preferencial de estados de uma determinada quiralidade [86]. Além disso, outro experimento foi realizado para emular o modelo de Hubbard unidimensional de duas partículas em um sistema fotônico. Ao atingir o regime de interação forte, demonstrou-se a formação de estados ligados através de observações diretas de tunelamento de pares [87]. Adicionalmente, investigou-se os efeitos da interação entre dois bósons em uma caminhada quântica, e o limite de interação fraca desse efeito foi experimentalmente mensurado utilizando a propagação da luz em redes fotônicas não lineares [88].

Neste trabalho, o sistema envolve dois elétrons com *spins* opostos, sujeitos a uma interação do tipo Hubbard que decresce exponencialmente com a distância. A análise abordou a evolução temporal dos pacotes de ondas eletrônicas, envolvendo a diagonalização do Hamiltoniano, além da aplicação de um tratamento analítico. Os resultados revelaram o surgimento de uma sub-banda de estados ligados, observando-se que ela se desloca na energia e reduz sua largura à medida que U aumenta. A análise da evolução temporal destacou o fenômeno de dobramento de frequência dos modos de oscilação.

2.2 Modelo e Formalismo

O Hamiltoniano de Anderson-Hubbard para esse sistema no formalismo de segunda quantização é dado por:

$$H = T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} + U \sum_{n,m} e^{-D_U|n-m|} \hat{\eta}_{n,1} \hat{\eta}_{m,2} + \sum_n \sum_{\sigma} \epsilon_n \hat{\eta}_{n,\sigma}, \quad (2.1)$$

¹ Nanopartículas ou nanocristais de material semiconductor com dimensões variando de 2 a 10 nm.

onde $c_{n,\sigma}^\dagger(c_{n,\sigma})$ são operadores de criação (aniquilação) para uma partícula com *spin* $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ e sítio n e com $\hat{\eta}_{n,\sigma} = c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}$. ϵ_n é a energia de interação elétron/íon no sítio n . Os estados de posição na representação de Wannier podem ser escritos da seguinte forma:

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

sendo $|n, \sigma; m, \sigma'\rangle$ o estado de um elétron com *spin* σ , no sítio n , e o outro elétron com *spin* σ' , no sítio m . Com a finalidade de estudar o comportamento estático dos dois elétrons é necessário resolver a equação de Schrödinger independente do tempo, para isso, é feita a substituição da Eq.(2.1) na referida equação, logo,

$$\begin{aligned} H |\Phi(n, m)\rangle = T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} |\Phi\rangle + U \sum_{n,m} e^{-D_U|n-m|} \hat{\eta}_{n,1} \hat{\eta}_{m,2} |\Phi\rangle \\ + \sum_n \sum_{\sigma} \epsilon_n \hat{\eta}_{n,\sigma} |\Phi\rangle = E |\Phi(n, m)\rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Com o objetivo de solucionar a Eq.(2.3) é preciso escrever o Hamiltoniano de forma matricial, logo, para ajudar no desenvolvimento dos cálculos da resolução da equação de Schrödinger, os termos dessa equação são reescritos da seguinte forma:

$$H = \begin{cases} H_1 = T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma}; \\ H_2 = U \sum_{n,m} e^{-D_U|n-m|} \hat{\eta}_{n,1} \hat{\eta}_{m,2}; \\ H_3 = \sum_n \sum_{\sigma} \epsilon_n \hat{\eta}_{n,\sigma}. \end{cases} \quad (2.4)$$

Considerando que ambos elétrons estejam no mesmo orbital atômico, ou seja, $n = m$ para as três equações de (2.4),

- Para H_1 ,

$$\begin{aligned} H_1 |\Phi\rangle &= T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} \sum_{n,m} f_{n,m} |n, \sigma; m, \sigma'\rangle; \\ &= T \sum_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} f_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} (c_{n_{\uparrow}+1, \uparrow}^\dagger c_{n_{\uparrow}, \uparrow} + c_{n_{\uparrow}+1, \downarrow}^\dagger c_{n_{\uparrow}, \downarrow} + c_{n_{\uparrow}, \uparrow}^\dagger c_{n_{\uparrow}+1, \uparrow} + c_{n_{\uparrow}, \downarrow}^\dagger c_{n_{\uparrow}+1, \downarrow}) |n_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle; \\ &= T \sum_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} f_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} (|n+1_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle + |n_{\uparrow}, n+1_{\downarrow}\rangle + |n-1_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle + |n_{\uparrow}, n-1_{\downarrow}\rangle). \end{aligned} \quad (2.5)$$

- Para H_2 ,

$$\begin{aligned} H_2 |\Phi\rangle &= U \sum_n e^{-D_U|n-n|} c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} \sum_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} f_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} |n_{\uparrow}, m_{\downarrow}\rangle \\ &= U \sum_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} f_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} |n_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

- Para H_3 ,

$$\begin{aligned}
H_3 |\Phi\rangle &= \sum_n \sum_\sigma \epsilon_n c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} \sum_{n,m} f_{n,m} |n, \sigma; m, \sigma'\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} \sum_n \epsilon_n (c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} + c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow}) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_n + \epsilon_n) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle \\
&= \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} 2\epsilon_n |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle. \tag{2.7}
\end{aligned}$$

Com o uso das Eqs.(2.5), (2.6) e (2.7), é possível reescrever a equação de Schrödinger para dois elétrons no mesmo sítio na forma

$$\begin{aligned}
E |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} [T(|n + 1_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n - 1_\downarrow\rangle) \\
+ (U + 2\epsilon_n) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle]. \tag{2.8}
\end{aligned}$$

Agora, considerando $m = n + 1$ em (2.4),

- Para H_1 ,

$$\begin{aligned}
H_1 |\Phi\rangle = T \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (|n + 1_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle \\
+ |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle). \tag{2.9}
\end{aligned}$$

- Para H_2 ,

$$H_2 |\Phi\rangle = U e^{-Dv} \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle. \tag{2.10}$$

- Para H_3 ,

$$H_3 |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_n + \epsilon_{n+1}) |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle. \tag{2.11}$$

Reescrevendo a equação de Schrödinger usando (2.9), (2.10) e (2.11),

$$\begin{aligned}
E |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} [T(|n + 1_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle) \\
+ (\epsilon_n + \epsilon_{n+1} + U e^{-Dv}) |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle]. \tag{2.12}
\end{aligned}$$

Por fim, considerando $m = n + 2$ em (2.4),

- Para H_1 ,

$$\begin{aligned}
H_1 |\Phi\rangle = T \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (|n + 1_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 3_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle \\
+ |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle). \tag{2.13}
\end{aligned}$$

- Para H_2 ,

$$H_2 |\Phi\rangle = Ue^{-2D_U} \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle. \quad (2.14)$$

- Para H_3 ,

$$H_3 |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_n + \epsilon_{n+2}) |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle. \quad (2.15)$$

Reescrevendo a equação de Schrödinger usando (2.13), (2.14) e (2.15),

$$E |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} [T(|n + 1_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 3_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle) + (\epsilon_n + \epsilon_{n+2} + Ue^{-2D_U}) |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle]. \quad (2.16)$$

Aplicando $\langle\Phi|$ nas Eqs.(2.8), (2.12) e (2.16) e considerando somente os termos não nulos dos somatório,

- Para $n = m$,

$$E f_{n,n} = T(f_{n+1,n} + f_{n,n+1} + f_{n-1,n} + f_{n,n-1}) + (2\epsilon_n + U)f_{n,n}. \quad (2.17)$$

- Para $m = n + 1$,

$$E f_{n,n+1} = T(f_{n+1,n+1} + f_{n,n+2} + f_{n-1,n+1} + f_{n,n}) + (\epsilon_n + \epsilon_{n+1} + Ue^{-D_U})f_{n,n+1}. \quad (2.18)$$

- Para $m = n + 2$,

$$E f_{n,n+2} = T(f_{n+1,n+2} + f_{n,n+3} + f_{n-1,n+2} + f_{n,n+1}) + (\epsilon_n + \epsilon_{n+2} + Ue^{-2D_U})f_{n,n+2}. \quad (2.19)$$

Finalmente, comparando (2.17), (2.18) e (2.19), a equação de Schrödinger independente do tempo é dada por:

$$E f_{n,m} = T(f_{n+1,m} + f_{n,m+1} + f_{n-1,m} + f_{n,m-1}) + (\epsilon_n + \epsilon_m + Ue^{-D_U|n-m|})f_{n,m}. \quad (2.20)$$

Essa é a relação de recorrência para as amplitudes de probabilidade $f_{n,m}$ que foram obtidas a partir da equação de Schrödinger. Com o uso dessa relação é possível obter a representação matricial do Hamiltoniano H , que é construído a partir de um espaço de Hilbert expandido, da ordem de N^2 , sendo N o tamanho da rede. Assim, para uma rede

unidimensional de 3 sítios, a matriz é dada por:

$$\mathbf{H} = \begin{array}{c|ccccccccc}
 N=3 & |1,1\rangle & |1,2\rangle & |1,3\rangle & |2,1\rangle & |2,2\rangle & |2,3\rangle & |3,1\rangle & |3,2\rangle & |3,3\rangle \\
 \hline
 \langle 1,1| & 2\epsilon_1 + U & T & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle 1,2| & T & \epsilon_1 + \epsilon_2 + Ue^{-Dv} & T & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle 1,3| & 0 & T & \epsilon_1 + \epsilon_3 + Ue^{-2Dv} & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 \\
 \langle 2,1| & T & 0 & 0 & \epsilon_2 + \epsilon_1 + Ue^{-Dv} & T & 0 & T & 0 & 0 \\
 \langle 2,2| & 0 & T & 0 & T & 2\epsilon_2 + U & T & 0 & T & 0 \\
 \langle 2,3| & 0 & 0 & T & 0 & T & \epsilon_2 + \epsilon_3 + Ue^{-Dv} & 0 & 0 & T \\
 \langle 3,1| & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 + Ue^{-2Dv} & T & 0 \\
 \langle 3,2| & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & T & \epsilon_3 + \epsilon_2 + Ue^{-Dv} & T \\
 \langle 3,3| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & T & 2\epsilon_3 + U
 \end{array} \quad (2.21)$$

2.2.1 Análise Analítica

Nesta seção, será feita uma análise analítica desse sistema de duas partículas para entender melhor a estrutura de bandas. O sistema de N^2 equações é dado pela Eq.(2.20) e como a rede é puramente cristalina, as energias de interação elétron-íon são nulas ($\epsilon_n = \epsilon_m = 0$). Da Eq.(2.20),

$$E f_{n,m} = T(f_{n+1,m} + f_{n,m+1} + f_{n-1,m} + f_{n,m-1}) + Ue^{-Dv|n-m|} f_{n,m}. \quad (2.22)$$

Assumindo uma mudança para coordenadas de centro de massa dos dois elétrons, com o uso de:

$$f_{n,m} = e^{ik(n+m)a} \chi(n-m), \quad (2.23)$$

onde k é o momento do centro de massa e a é o espaçamento da rede, de modo que substituindo (2.23) em (2.22),

$$\begin{aligned}
 E\chi(n-m) = T[e^{ika}(\chi(n+1-m) + \chi(n-m-1)) + e^{-ika}(\chi(n-1-m) \\
 + \chi(n-m+1))] + Ue^{-Dv|n-m|}\chi(n-m). \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

Com a substituição de $r = n - m$ e $2 \cos(ka) = e^{ika} + e^{-ika}$,

$$E\chi(r) = 2T \cos(ka)[\chi(r-1) + \chi(r+1)] + Ue^{-Dv|r|}\chi(r). \quad (2.25)$$

Considerando a presença de estados de paridade par, será realizada uma análise para algumas situações.

- A situação em que não há interação entre os elétrons ($U = 0$), logo, a Eq.(2.25) é dada por:

$$E\chi(r) = 2T \cos(ka)[\chi(r-1) + \chi(r+1)]. \quad (2.26)$$

Como não tem interação entre as partículas é possível fazer $\chi(r) = e^{irqa}$, assim, a Eq.(2.26) torna-se:

$$\begin{aligned}
 Ee^{irqa} &= 2T \cos(ka)[e^{i(r-1)qa} + e^{i(r+1)qa}]; \\
 &= 2T \cos(ka)(e^{-iqa} + e^{iqa}); \\
 E &= 4T \cos(ka) \cos(qa), \quad (2.27)
 \end{aligned}$$

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

- Para o caso em que os autovetores têm paridade par, tem-se a relação $\chi(-r) = \chi(r)$, uma vez que a função de onda é simétrica e há interação entre os elétrons ($U \neq 0$). Com isso, é considerado um parâmetro, tal que,

$$\chi(r+1) = \beta\chi(r).$$

1. Para $r = 0$ em (2.25),

$$\begin{aligned} E\chi(0) &= 2T \cos(ka)[\chi(-1) + \chi(1)] + U\chi(0); \\ &= 4T\beta \cos(ka)\chi(0) + U\chi(0). \end{aligned}$$

Simplificando a expressão e isolando β ,

$$\beta = \frac{E - U}{4T \cos(ka)}. \quad (2.28)$$

2. Para $r = 1$ em (2.25),

$$E\chi(1) = 2T \cos(ka)[\chi(0) + \chi(2)] + Ue^{-Dv}\chi(1).$$

Com o uso da relação $\chi(r+1) = \beta\chi(r)$,

$$\begin{aligned} E\beta\chi(0) &= 2T \cos(ka)[\chi(0) + \beta^2\chi(0)] + Ue^{-Dv}\beta\chi(0); \\ (E - Ue^{-Dv})\beta &= 2T \cos(ka)(1 + \beta^2); \\ \beta + \frac{1}{\beta} &= \frac{E - Ue^{-Dv}}{2T \cos(ka)}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Substituindo (2.28) em (2.29),

$$\begin{aligned} \frac{E - Ue^{-Dv}}{2T \cos(ka)} &= \frac{E - U}{4T \cos(ka)} + \frac{4T \cos(ka)}{E - U}; \\ E^2 - 2EUe^{-Dv} + [2U^2e^{-Dv} - U^2 - 16T^2 \cos^2(ka)] &= 0. \end{aligned}$$

Para $Z = 2U^2e^{-Dv} - U^2 - 16T^2 \cos^2(ka) = U^2(2e^{-Dv-1} - 16T^2 \cos(ka))$, a seguinte equação de 2º grau é obtida:

$$E^2 - 2EUe^{-Dv} + Z = 0.$$

Com o uso de Bhaskara,

$$E = Ue^{-Dv} \pm \sqrt{16T^2 \cos^2(ka) - U^2(2e^{-Dv} - e^{-2Dv} - 1)}, \quad (2.30)$$

onde o sinal (\pm) depende do sinal de U . Entretanto, nesse estudo foi considerado apenas o caso $U > 0$. Dessa forma, é possível encontrar uma sub-banda de estados com largura

$$U \leq E \leq Ue^{-Dv} + \sqrt{16T^2 - U^2(2e^{-Dv} - e^{-2Dv} - 1)}. \quad (2.31)$$

Para o caso onde os autovetores tem paridade ímpar, ou seja, $\chi(-r) = -\chi(r)$, a mesma largura da sub-banda é encontrada.

2.2.2 Sistema sob efeito do Campo Elétrico

Com o interesse em investigar o comportamento de dois elétrons sob influência de um campo elétrico uniforme e constante, é adicionado ao Hamiltoniano (2.1) um termo que representa a influência de um campo elétrico constante e uniforme sobre as partículas por toda a rede. Assim, o Hamiltoniano é

$$H = T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} + U \sum_{n,m} e^{-Dv|n-m|} \hat{\eta}_{n,1} \hat{\eta}_{m,2} + \sum_n \sum_{\sigma} (\epsilon_n + eF\mathbf{n}) \hat{\eta}_{n,\sigma}, \quad (2.32)$$

onde F é o campo elétrico externo paralelo à rede, e é a carga das partículas e \mathbf{n} é o operador posição da partícula. Agora, para estudar o comportamento dinâmico dos elétrons sob efeito do campo elétrico, é preciso resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, dada por:

$$H |\Phi(n, m)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(n, m)\rangle. \quad (2.33)$$

Substituindo (2.32) em (2.33),

$$\begin{aligned} H |\Phi(n, m)\rangle &= T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} |\Phi\rangle + U \sum_{n,m} e^{-Dv|n-m|} \hat{\eta}_{n,1} \hat{\eta}_{m,2} |\Phi\rangle \\ &\quad + \sum_n \sum_{\sigma} (\epsilon_n + eF\mathbf{n}) \hat{\eta}_{n,\sigma} |\Phi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(n, m)\rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Repetindo o que foi feito na seção anterior, é possível reescrever essa equação da seguinte forma

$$H = \begin{cases} H_4 = T \sum_{\langle n,m \rangle} \sum_{\sigma} c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma}; \\ H_5 = U \sum_{n,m} e^{-Dv|n-m|} \hat{\eta}_{n,1} \hat{\eta}_{m,2}; \\ H_6 = \sum_n \sum_{\sigma} (\epsilon_n + eF\mathbf{n}) \hat{\eta}_{n,\sigma}. \end{cases} \quad (2.35)$$

A diferença entre os Hamiltonianos (2.34) e (2.1) é termo que contém à influência do campo elétrico. Os demais termos H_1 e H_2 da Eq.(2.3) são iguais, respectivamente, aos termos H_4 e H_5 da Eq.(2.35). Com isso, os cálculos desenvolvidos adiante serão somente para H_6 . Considerando $n = m$,

$$\begin{aligned} H_6 |\Phi\rangle &= \sum_n \sum_{\sigma} (\epsilon_n + eF\mathbf{n}) c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} \sum_{n,m} f_{n,m} |n, \sigma; m, \sigma'\rangle; \\ &= \sum_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} f_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} \sum_n (\epsilon_n + eF\mathbf{n}) (c_{n_{\uparrow}, \uparrow}^{\dagger} c_{n_{\uparrow}, \uparrow} + c_{n_{\downarrow}, \downarrow}^{\dagger} c_{n_{\downarrow}, \downarrow}) |n_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle; \\ &= \sum_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} f_{n_{\uparrow}, m_{\downarrow}} 2(\epsilon_n + eFn) |n_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Com o uso de (2.5), (2.6) e (2.36), a equação de Schrödinger dependente do tempo toma a forma:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(n, m)\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} [T(|n + 1_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n - 1_\downarrow\rangle) + (2\epsilon_n + 2eFn + U) |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle]. \quad (2.37)$$

Agora, tomando $m = n + 1$,

$$H_6 |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_n + eFn + \epsilon_{n+1} + eF(n + 1)) |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle. \quad (2.38)$$

Reescrevendo a equação de Schrödinger dependente do tempo usando (2.9), (2.10) e (2.38),

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(n, m)\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} [T(|n + 1_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle) + (\epsilon_n + eFn + \epsilon_{n+1} + eF(n + 1) + Ue^{-Dv}) |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle]. \quad (2.39)$$

Finalmente, considerando $m = n + 2$,

$$H_6 |\Phi\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} (\epsilon_n + eFn + \epsilon_{n+2} + eF(n + 2)) |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle. \quad (2.40)$$

Por fim, a equação de Schrödinger dependente do tempo usando (2.13), (2.14) e (2.40), é dada por:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(n, m)\rangle = \sum_{n_\uparrow, m_\downarrow} f_{n_\uparrow, m_\downarrow} [T(|n + 1_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 3_\downarrow\rangle + |n - 1_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle + |n_\uparrow, n + 1_\downarrow\rangle) + (\epsilon_n + eFn + \epsilon_{n+2} + eF(n + 2) + Ue^{-2Dv}) |n_\uparrow, n + 2_\downarrow\rangle]. \quad (2.41)$$

Aplicando $\langle\Phi(n, m)|$ nas Eqs.(2.37), (2.39) e (2.41),

- Para $n = m$,

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n,n} = T(f_{n+1,n} + f_{n,n+1} + f_{n-1,n} + f_{n,n-1}) + (2\epsilon_n + 2eFn + U)f_{n,n}. \quad (2.42)$$

- Para $m = n + 1$,

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{n,n+1} = T(f_{n+1,n+1} + f_{n,n+2} + f_{n-1,n+1} + f_{n,n}) + (\epsilon_n + \epsilon_{n+1} + eFn + eF(n + 1) + Ue^{-Dv})f_{n,n+1}. \quad (2.43)$$

- Para $m = n + 2$,

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} f_{n,n+2} &= T(f_{n+1,n+2} + f_{n,n+3} + f_{n-1,n+2} + f_{n,n+1}) \\
&+ (\epsilon_n + \epsilon_{n+2} + eFn + eF(n+2) + Ue^{-2D_U})f_{n,n+2}.
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Comparando (2.42), (2.43) e (2.44), a equação de Schrödinger é

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} f_{n,m}(t) &= T(f_{n+1,m}(t) + f_{n,m+1}(t) + f_{n-1,m}(t) + f_{n,m-1}(t)) \\
&+ (\epsilon_n + \epsilon_m + eF(n+m) + Ue^{-D_U|n-m|})f_{n,m}(t).
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Com essas equações é possível estudar a evolução temporal dos pacotes de onda eletrônicos. Assim, para resolvê-las numericamente, o método da expansão de Taylor do operador de evolução temporal é usado, apresentado no Apêndice C. Neste problema, é considerado a condição inicial em que os dois elétrons estão posicionados no centro da rede, ou seja, $q_n = N/2$. Os parâmetros para realizar os cálculos foi um passo no tempo de $\Delta t \approx 1,0 \times 10^{-3}$, onde o número de termos na expansão de Taylor é da ordem de $n_0 = 12$.

As principais medidas são: Densidade de estados,

$$DOS(E) = \sum_j \delta(E - E_j). \tag{2.46}$$

A posição média do pacote de onda (centroide) para um dado tempo t ,

$$\langle n \rangle_i(t) = \sum_{n,m} n_i |f_{n,m}(t)|^2, \tag{2.47}$$

com $i = 1, 2$. A probabilidade de Dupla Ocupação (PDO),

$$PDO(t) = \langle \sum_n |f_{n,n}(t)|^2 \rangle. \tag{2.48}$$

A probabilidade de Ocupação de Primeiros Vizinhos (PO1V),

$$PO1V(t) = \langle \sum_{n=m\pm 1} |f_{n,m}(t)|^2 \rangle. \tag{2.49}$$

A probabilidade de Ocupação de Segundos Vizinhos (PO2V),

$$PO2V(t) = \langle \sum_{n=m\pm 2} |f_{n,m}(t)|^2 \rangle. \tag{2.50}$$

2.3 Resultados e Discussões

Nesta seção, são discutidos os resultados de dois elétrons em uma rede unidimensional sob a influência de um campo elétrico externo. Na Fig. 13, que foi obtida através da diagonalização numérica de uma rede unidimensional de $N = 100$ sítios, os resultados são referentes a DOS em relação a energia E para $U = 6$, $U = 12$ e $U = 18$, com $D_U = 1$, $D_U = 0,5$ e $D_U = 0,25$, respectivamente. Na Fig. 13 no caso em que $U = 6$, pode-se ver o

aparecimento de uma sub-banda de estados ligados, cuja largura é dada pela Eq.(1.40). Com um pouco mais de atenção, é possível observar alguns picos na banda principal (estados não-ligados), mesmo depois da formação de uma sub-banda. Com o aumento do valor de U , como para $U = 12$, novas sub-bandas se formam. Também é preciso notar que a posição na energia da primeira sub-banda formada está na ordem do valor de U .

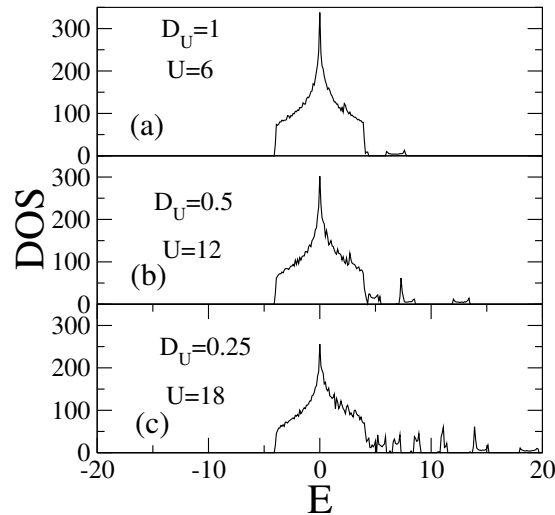


Figura 13. Densidade de estados em função da energia para (a) $U = 6$ e $D_U = 1$; (b) $U = 12$ e $D_U = 0.5$; (c) $U = 18$ e $D_U = 0.25$. Para $U > 0$ aparece uma sub-banda de estados ligados. Com o aumento dos valores de U , mais sub-bandas surgem.

Analisando a PDO, PO1V e PO2V em função da interação U . Como mostrado na Fig. 14 para $D_U = 0.25$ a PDO tem um valor máximo em torno de $U = 15$, onde a sub-banda de estados ligados se separa da banda de estados principal. Como a interação

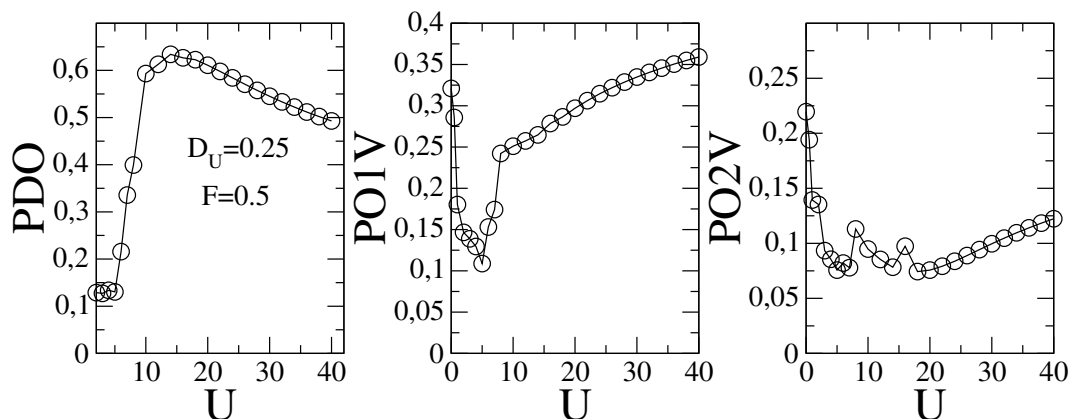


Figura 14. PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 0.25$ e $F=0.5$. A PDO mostra uma probabilidade máxima em torno de $U = 15$ tendo um leve decaimento para valores maiores de U . A PO1V tem um decaimento pra os valores iniciais de U , mas a partir de $U = 10$ assume valores maiores a medida que U aumenta. A PO2V toma sempre valores baixos se comparados com a PO1V.

entre os elétrons é de aproximadamente uma exponencial, o decaimento do PDO é mais lento para pequenos valores de D_U . A separação da sub-banda de estados ligados da banda principal beneficia os estados de ocupação dos primeiros vizinhos, aumentando o valor da PO1V. Como o PO1V continua assumindo valores finitos ao longo do tempo, isso indica um domínio do *hopping* para primeiros vizinhos. A PO2V assume valores menores do que os PO1V, indicando a predominância de um movimento coerente dos dois elétrons para os primeiros vizinhos.

Na Fig. 15 em que $D_U = 0.5$, é possível observar que o ponto máximo assumido pela PDO é em torno de $U = 10$ e seu decaimento é mais rápido comparado ao que foi observado na Fig. 14. Como resultado, o valor de PO1V para $U = 40$ é maior que o verificado na Fig. 14, ao contrário dos valores de PO2V, que continuam caindo conforme aumentamos D_U .

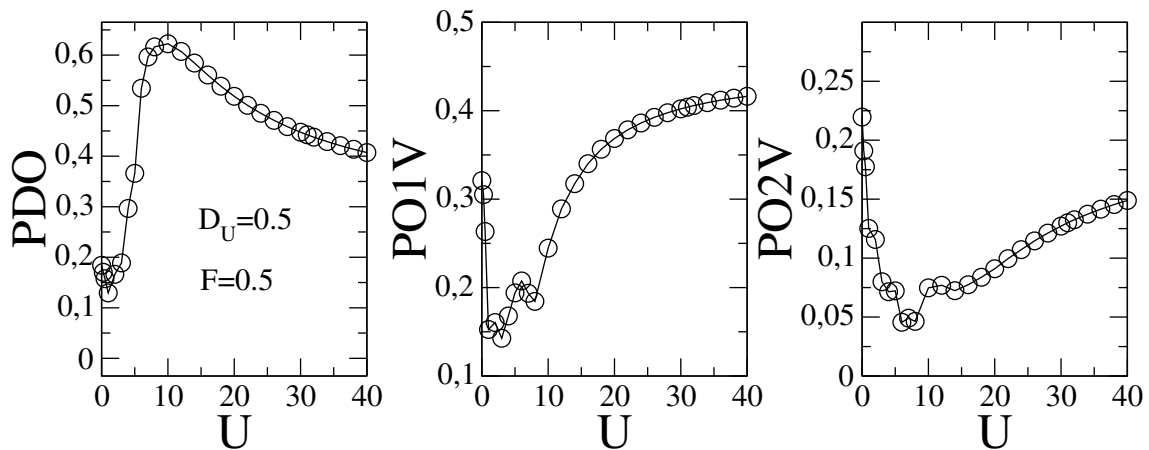


Figura 15. PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 0.5$ e $F=0.5$. Para esse caso, a probabilidade máxima da PDO é em torno de $U = 10$ com um decaimento mais acentuado. A PO1V assume valores cada vez maiores a partir de $U = 10$. Por fim, a PO2V continua tomando valores baixos.

Com a análise das Figs. 16 e 17, percebe-se com o aumento do valor de D_U , o ponto máximo de PDO assume valores menores de U , isso indica que a sub-banda de estados ligados se separa da banda principal para interações mais fracas. Um decaimento mais intenso também pode ser observado para valores crescentes de U . Com relação a PO1V, é observado valores cada vez maiores, pois a interação favorece a associação de saltos coerentes associados a estados ligados, seu caráter repulsivo diminui a PDO decorrente da superposição com estados não-ligados. A PO2V diminui para grandes valores de U , indicando o domínio de caminhada quântica para os primeiros vizinhos.

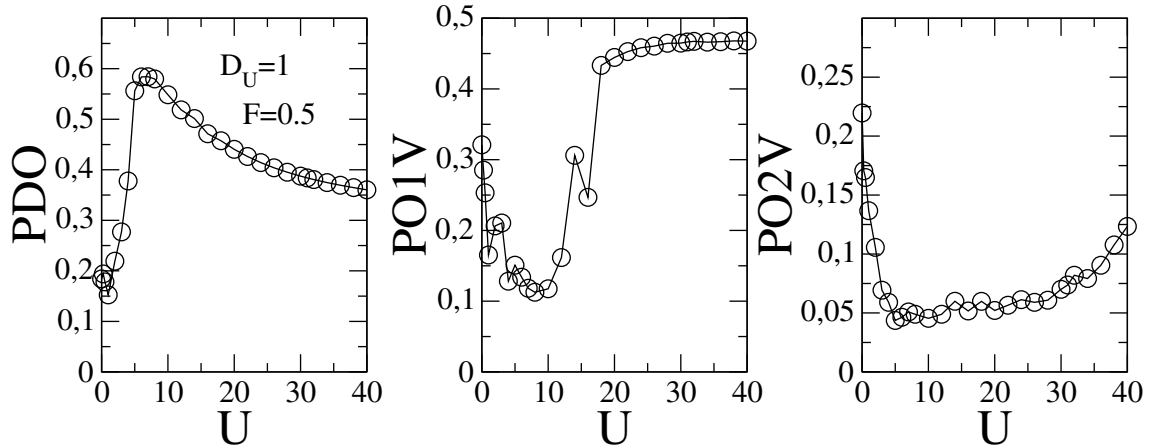


Figura 16. PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 1$ e $F=0.5$. O ponto máximo da PDO em relação a U continua diminuindo. E para PO1V e PO2V a tendência é a mesma dos resultados observados nas Figs. 14 e 15, ou seja, a PO1V assumindo valores maiores com o aumento de U e a PO2V tomando valores baixos.

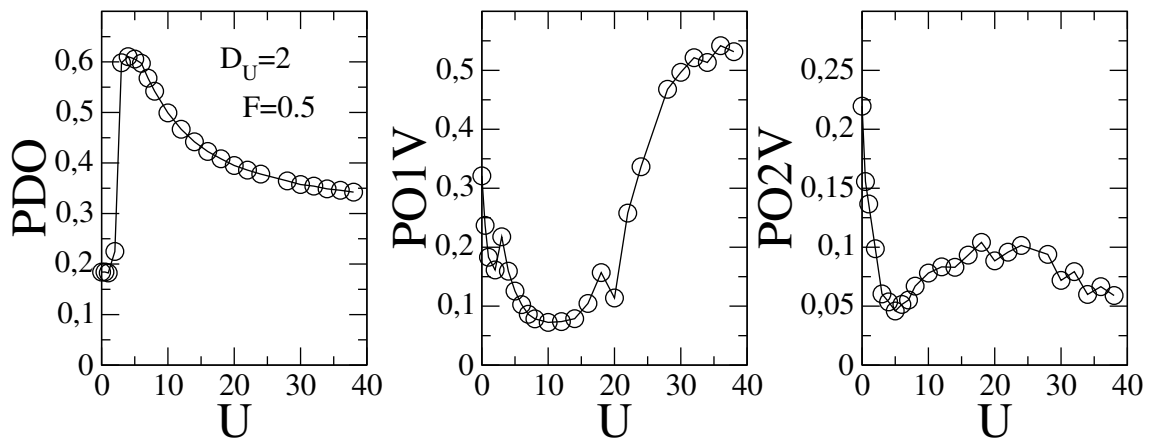


Figura 17. PDO, PO1V e PO2V para $D_U = 2$ e $F=0.5$. A tendência da diminuição do ponto máximo da PDO em relação a U é preservada. Com a análise das PO1V e PO2V é possível concluir que a dinâmica de primeiros vizinhos é favorecida.

Com a análise da dupla ocupação é verificado que os pontos máximos da PDO assumem valores menores conforme aumentamos D_U , desse modo, foi plotado a Fig. 18 para visualizar o comportamento da interação U em função de D_U . Com isso, verificou-se que o surgimento da duplicação da frequência ocorre para valores cada vez menores de U à medida que D_U é aumentado. Considerando a situação em que os dois elétrons estão inicialmente posicionados no centro da rede e usando a equação de Schrödinger dependente do tempo, é possível calcular o centroide (ver Fig. 19) e pode-se observar que os elétrons apresentam um comportamento oscilatório. A sub-banda de estado ligado muda de energia e diminui de largura conforme U cresce. Isso causa uma disputa entre os estados ligado e não ligado, com isso, surge um regime em que a dinâmica coerente dos elétrons é favorecida. Calculando a transformada de Fourier dos centroides, é mostrado um modo dominante de oscilação em $\omega = 2F$ e outro com menor amplitude em torno de $\omega = F$. O primeiro modo

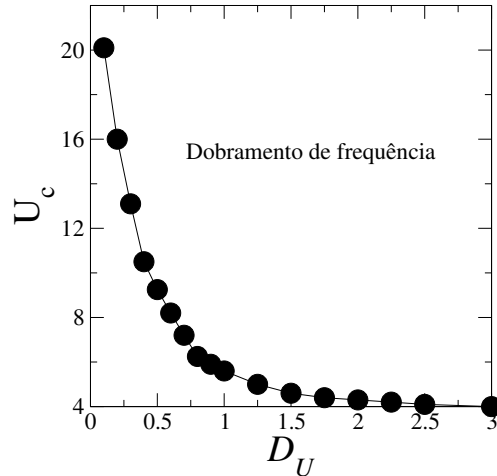


Figura 18. Comportamento de U em função de D_U para valores de frequência dobrada. Para valores de U e D_U acima da curva, é possível obter o dobramento da frequência das oscilações de Bloch. Para valores abaixo da curva, o dobramento da frequência não é observado.

é resultado do movimento coerente entre os elétrons e o segundo causado pelos estados não ligados, que representa as oscilações não coerentes.

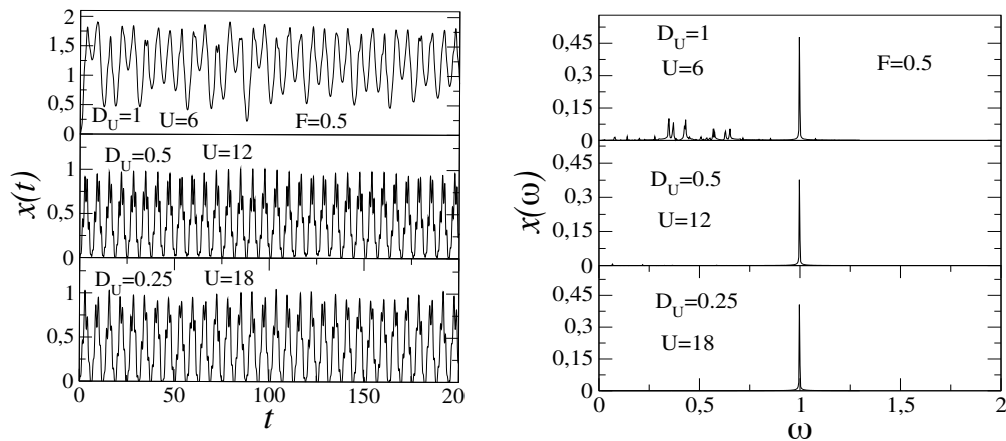


Figura 19. Posição média $x(t)$ de dois elétrons em uma rede com $N = 100$ sítios na presença de um campo elétrico com intensidade de $F = 0.5$. Primeiro quadro: $D_U = 1$ e $U = 6$; Segundo quadro: $D_U = 0.5$ e $U = 12$; Terceiro quadro: $D_U = 0.25$ e $U = 18$. No lado direito é mostrado a transformada de Fourier $x(\omega)$, onde é observado uma frequência dominante em $\omega = 2F$.

Em resumo, neste capítulo foi estudado um modelo de dois elétrons com *spins* opostos em um sistema unidimensional. O termo de interação elétron-elétron foi considerado de tal forma a ter uma intensidade U e um decaimento exponencial com distância efetiva dada por $1/D_U$. No limite de D_U grande esse modelo converge para o modelo de dois elétrons com interações locais (ou seja, no mesmo átomo). Para D_U pequeno as interações entre elétrons é em átomos vizinhos. Usando métodos numéricos foi mostrado que a interação elétron-elétron cria uma sub-banda de estados ligados, separando-se inicialmente da banda de estados principal para $U = 6$, também observada para $U = 12$. No limite de D_U pequeno os resultados mostram o surgimento de uma nova sub-banda devido à interação entre os primeiros vizinhos e o alargamento desta sub-banda devido à interação local entre as partículas. A dinâmica do sistema sob ação de um campo elétrico externo mostra que a interação entre as partículas promove um movimento coerente, resultando no surgimento de modos de oscilação com frequência dobrada.

3 Sistema com Acoplamento Elétron-Sóliton e Interação Cúbica

3.1 Introdução

Diversas pesquisas recentes têm explorado sistemas com interação elétron-fônon, como demonstrado por Kurzhals *et al.* [89], que utilizaram o acoplamento elétron-fônon para evidenciar estados supercondutores no YNi₂B₂C. Em um estudo conduzido por Chatelain *et al.* [90], observou-se a presença de acoplamento elétron-fônon coerente e incoerente no grafite, empregando difração eletrônica ultrarrápida. Vários outros trabalhos [91, 92, 93] abordam essa temática. Sistemas com acoplamento elétron-rede têm sido objeto de várias pesquisas que indicaram que essa interação em uma rede não linear facilita o transporte de carga [94, 95, 96, 97]. Em um cenário com um Hamiltoniano *tight-binding* descrevendo um elétron em uma rede unidimensional, como proposto pelo modelo SSH de Su *et al.* [16], os termos fora da diagonal (*hopping*) são dependentes das vibrações da rede, ou seja, há a presença da interação elétron-fônon. Considerou-se que o termo de *hopping* depende da distância entre os átomos vizinhos através de uma função linear.

Davydov contribuiu significativamente para a descrição da dinâmica eletrônica na presença de vibrações da rede, como evidenciado em diversos de seus trabalhos [60, 98, 99, 15]. Em seu formalismo, ele proporciona uma descrição da interação dos modos de *excíton*¹ com os fônons da rede. No contexto de redes não lineares, uma ampla gama de pesquisas demonstra a possibilidade do transporte de cargas mediado por *solelectron*² [100, 101]. No estudo conduzido por de Moura [56], foi teoricamente demonstrado que as excitações solitônicas na presença de uma rede com não linearidade cúbica podem impulsionar a dinâmica eletrônica ao longo da cadeia.

Com o passar do tempo, observa-se um aumento no interesse da comunidade científica em relação aos materiais SAW, ou seja, materiais baseados em ondas acústicas de superfície [23]. No estudo conduzido por Mayer [24], foram explorados métodos teóricos para a análise de SAW e o efeito da não-linearidade em sua propagação. Um dos efeitos examinados incluiu a alteração da frequência das SAW devido a tensões estáticas e campos elétricos aplicados externamente. Trabalhos experimentais recentes têm se concentrado em SAW, como a investigação da dinâmica de tunelamento realizada por Kataoka *et al.* [102], empregando uma escala de tempo de sub-nanosegundos. Ondas acústicas de superfície (SAWs) foram empregadas para gerar pontos quânticos dinâmicos em um canal

¹ Quase-partícula formada pelo par elétron-buraco

² Quase-partícula derivada do acoplamento elétron-sóliton

unidimensional, transportando um elétron cada na velocidade da SAW. Em outra pesquisa conduzida por Kataoka *et al.* [103], a evolução temporal de uma função de onda de um único elétron foi investigada utilizando pontos quânticos em movimento definidos por SAW. Dada a limitação da largura da banda que afeta a dinâmica coerente do sistema, um procedimento foi proposto para superar esse desafio. Pontos quânticos percorrem um potencial estático, e diferentes regiões de confinamento resultam na excitação dos elétrons em uma superposição de estados. Em um estudo experimental realizado por Hsiao *et al.*, [104] foi investigada a geração de fótons individuais, sem o uso de pontos quânticos. Os autores conduziram o transporte de um único elétron em um potencial mínimo de um SAW para uma região de buracos para formar um *excíton*.

Neste estudo, a propagação de um elétron em uma cadeia anarmônica com interação cúbica entre os sítios vizinhos foi investigada. O termo de *hopping* segue uma função linear entre dois sítios vizinhos, aderindo ao modelo SSH. Esse termo incorpora o acoplamento elétron-rede. Assim, por meio da solução numérica das equações que governam a dinâmica do elétron e da rede, torna-se possível examinar um pacote de ondas inicialmente localizado. Na próxima seção, detalharemos o modelo utilizado neste estudo.

3.2 Modelo e Formalismo

O acoplamento entre as massas da nossa rede será descrita pelo modelo γ -Fermi-Pasta-Ulam (FPU), ou seja, é considerado que os sítios vizinhos estejam acoplados por molas através de um potencial cúbico. Para esse modelo o Hamiltoniano pode ser escrito como $H = H_{ele} + H_{rede}$, onde H_{ele} descreve a parte eletrônica e H_{rede} descreve o comportamento da rede.

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N T_{n+1,n} (c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}); \quad (3.1)$$

$$H_{rede} = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2} + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N [(q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2] + \frac{1}{6} \sum_{n=1}^N [(q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3], \quad (3.2)$$

onde deve ser ressaltado que todas as massas são iguais à unidade ($m_n = 1$). $c_n^\dagger (c_n)$ são operadores de criação (aniquilação) para uma partícula no sítio n . p_n descreve o momento da n -ésima massa e q_n representa o deslocamento da massa no sítio n da sua posição de equilíbrio. Os elementos de *hopping* $T_{n+1,n}$ são dados por:

$$T_{n+1,n} = -[1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)], \quad (3.3)$$

onde é possível visualizar uma dependência da distância entre dois sítios vizinhos como descrito pelo modelo SSH [16], que se trata de uma aproximação de primeira ordem para $T_{n+1,n} = \exp[-\alpha(q_{n+1} - q_n)]$. O α descreve o acoplamento elétron-rede.

Agora será deduzido explicitamente as equações que governam a dinâmica eletrônica e as velocidades de vibração da rede. Para fazer essa dedução, deve-se começar reescrevendo a Eq.(3.1),

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N T_{n+1,n}(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|). \quad (3.4)$$

Atuando H_{ele} em um estado $|\Psi(t)\rangle$,

$$H_{ele} |\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N T_{n+1,n}(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) |\Psi(t)\rangle. \quad (3.5)$$

Usando a função de onda dependente do tempo na representação de Wannier $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n'} f_{n'}(t) |n'\rangle$, logo, a operação de H_{ele} em $|\Psi(t)\rangle$ é dada da seguinte maneira:

$$H_{ele} |\Psi(t)\rangle = H_{ele} \sum_{n'} f_{n'} |n'\rangle = \sum_{n'} f_{n'} H_{ele} |n'\rangle.$$

Fazendo uma análise de $H_{ele} |n'\rangle$, é possível observar que:

$$H_{ele} |n'\rangle = \sum_n T_{n+1,n}(|n\rangle \langle n+1|n'\rangle + |n+1\rangle \langle n|n'\rangle), \quad (3.6)$$

como $\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$, então a Eq.(3.6), torna-se:

$$H_{ele} |n'\rangle = \sum_n T_{n+1,n}(|n\rangle \delta_{n+1,n'} + |n+1\rangle \delta_{n,n'}). \quad (3.7)$$

Assim, pode-se reescrever a Eq.(3.5) da seguinte forma

$$H_{ele} |\Psi(t)\rangle = \sum_{nn'} f_{n'}(t) T_{n+1,n} |n\rangle \delta_{n+1,n'} + \sum_{nn'} f_{n'}(t) T_{n+1,n} |n+1\rangle \delta_{n,n'}. \quad (3.8)$$

Sabendo que $\sum_{nn'} \psi_n \delta_{n,n'} = \sum \psi_n$, para $n = n'$,

$$H_{ele} |\Psi(t)\rangle = \sum_n f_{n+1}(t) T_{n+1,n} |n\rangle + \sum_n f_n(t) T_{n+1,n} |n+1\rangle. \quad (3.9)$$

Logo, $\sum_n f_n(t) T_{n+1,n} |n+1\rangle = \sum_m f_{m-1}(t) T_{m,m-1} |m\rangle$, assim, tomando $m = n$,

$$\sum_n f_n(t) T_{n+1,n} |n+1\rangle = \sum_n f_{n-1}(t) T_{n,n-1} |n\rangle.$$

Reescrevendo a Eq.(3.8), fazendo uso destes resultados,

$$H_{ele} |\Psi(t)\rangle = \sum_n [f_{n+1}(t) T_{n+1,n} + f_{n-1}(t) T_{n,n-1}] |n\rangle. \quad (3.10)$$

Portando, a equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n f_n(t) |n\rangle &= \sum_n [f_{n+1}(t) T_{n+1,n} + f_{n-1}(t) T_{n,n-1}] |n\rangle; \\ \sum_n \left[i\hbar \frac{df_n(t)}{dt} - f_{n+1}(t) T_{n+1,n} - f_{n-1}(t) T_{n,n-1} \right] |n\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Como H_{ele} atuou em $|\Psi(t)\rangle$, pode-se reescrever a equação de Schrödinger para cada componente f_n da função de onda da seguinte forma ($\hbar = 1$):

$$i \frac{df_n(t)}{dt} = T_{n+1,n} f_{n+1}(t) + T_{n,n-1} f_{n-1}(t). \quad (3.12)$$

Considerando o termo de *hopping* definido da Eq.(3.3), chega-se na equação que descreve a dinâmica eletrônica neste modelo com acoplamento elétron-rede.

$$i \frac{df_n(t)}{dt} = -[1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)] f_{n+1}(t) - [1 - \alpha(q_n - q_{n-1})] f_{n-1}(t). \quad (3.13)$$

Uma vez deduzida a equação que rege a dinâmica do elétron, deve-se deduzir a equação que descreve a evolução temporal das vibrações harmônicas da rede. Para fazer isso, deve-se utilizar o formalismo de Hamilton para encontrar a equação que controla as vibrações atômicas. Do ponto de vista da mecânica clássica, a equação de Hamilton para o momento p_n pode ser escrita como $\dot{p}_n = -\partial \langle H \rangle / \partial q_n$, onde $\langle H \rangle = \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle$. Logo,

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) = \frac{dv_n}{dt} &= -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial q_n}; \\ a_n(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \left\{ \sum_{n=1}^N T_{n,n+1} (|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|) \right\} \\ &\quad + \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{2} + \frac{1}{4} \left\{ (q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2 \right\} \right\} \\ &\quad + \frac{1}{6} \sum_n \left\{ (q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3 \right\} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Como apenas o termo de *hopping* $T_{n,n+1}$, e o termo de energia potencial clássica dependem da posição q_n , desta forma, a derivada $-\partial \langle H \rangle / \partial q_n$ será composta pelos termos abaixo:

$$\begin{aligned} a_n(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \left\{ \sum_n T_{n,n+1} (|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_n \left\{ (q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2 \right\} \\ &\quad + \frac{1}{6} \sum_n \left\{ (q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3 \right\} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.15)$$

No primeiro termo é possível observar que os termos de ordem $n-1$ e n contém a posição q_n , e serão submetidos a derivada parcial, os demais termos do somatório não contém q_n e, portanto, suas derivadas se anulam. Para o segundo somatório, os termos de ordem $n-1$, n e $n+1$ contém a posição q_n . Assim, a Eq.(3.15) toma a forma:

$$\begin{aligned} a_n(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \left\{ \sum_n T_{n,n-1} (|n-1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n-1|) + T_{n+1,n} (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_n \left\{ (q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2 \right\} \\ &\quad + \frac{1}{3} \sum_n \left\{ (q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3 \right\} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Substituindo os respectivos termos de *hopping* como definido na Eq.(3.3) e atuando $\langle \Psi(t) |$ e $|\Psi(t)\rangle$, têm-se:

$$\begin{aligned}
a_n(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_n}[-[1 - \alpha(q_n - q_{n-1})](\langle \Psi(t) | n - 1 \rangle \langle n | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | n \rangle \langle n - 1 | \Psi(t) \rangle)] \\
&- [1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)](\langle \Psi(t) | n \rangle \langle n + 1 | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | n + 1 \rangle \langle n | \Psi(t) \rangle)] \\
&- \frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \frac{1}{2} \{ (q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2 \} | \Psi(t) \rangle \\
&- \frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \frac{1}{3} \{ (q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3 \} | \Psi(t) \rangle. \tag{3.17}
\end{aligned}$$

Lembrando que:

$$\langle \psi(t) | n - 1 \rangle \langle n | \Psi(t) \rangle = \sum_n f_n^\dagger \underbrace{\langle n | n - 1 \rangle}_{\delta_{n,n-1}} \sum_n f_n \underbrace{\langle n | n \rangle}_{\delta_{n,n}} = f_{n-1}^\dagger f_n. \tag{3.18}$$

Analogamente,

$$\langle \psi(t) | n \rangle \langle n + 1 | \Psi(t) \rangle = f_n^\dagger f_{n+1}. \tag{3.19}$$

Portanto, reescrevendo a Eq.(3.17) como:

$$\begin{aligned}
a_n(t) &= -\frac{\partial}{\partial q_n}[-[1 - \alpha(q_n - q_{n-1})](f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger) \\
&- [1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)](f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger)] \\
&- \frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \frac{1}{2} \{ (q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2 \} | \Psi(t) \rangle \\
&- \frac{\partial}{\partial q_n} \langle \Psi(t) | \frac{1}{3} \{ (q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3 \} | \Psi(t) \rangle. \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Por fim, deve-se calcular a derivada e fazer uso de $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$, com isso,

$$\begin{aligned}
a_n(t) &= \alpha(f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger) - \alpha(f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger) \\
&+ (q_{n+1} - q_n) - (q_n - q_{n-1}) \\
&+ [(q_{n+1} - q_n)^2 - (q_n - q_{n-1})^2]. \tag{3.21}
\end{aligned}$$

Para esse estudo, é o elétron inicialmente localizado no meio da rede, ou seja, no sítio $N/2$. A função de onda para $(t = 0)$ é $|\Psi(t = 0)\rangle = \sum_n f_n(t = 0) |n\rangle$, onde $f_n(t = 0) = \delta_{n,N/2}$. Para resolver numericamente essas equações, é feito o uso de dois métodos. Primeiro, para as equações quânticas (Eq. 3.13) o método usado foi o da expansão de Taylor de alta ordem, detalhado no Apêndice C. Para as equações clássicas (Eq. 3.21) é utilizado o método de Verlet [105]. Esse método é uma solução direta da equação de movimento de Newton ($F_n = m_n \ddot{q}_n$). Dada a posição em um tempo inicial t , é calculado essa mesma posição em um tempo $t + \Delta t$, assim, usando a expansão em série de Taylor,

$$\begin{aligned}
q_n(t + \Delta t) &\cong q_n(t) + \frac{dq_n(t)}{dt} \Delta t + \frac{d^2 q_n(t)}{dt^2} \frac{\Delta t^2}{2} + \mathcal{O}(t^3); \\
&\cong q_n(t) + p_n(t) \Delta t + a_n(t) \frac{\Delta t^2}{2}. \tag{3.22}
\end{aligned}$$

O momento é dada pela seguinte equação:

$$p_n(t + \Delta t) \cong p_n(t) + \frac{\Delta t}{2}[a_n(t) + a_n(t + \Delta t)]. \quad (3.23)$$

Neste trabalho, é detalhado a formação do par elétron-sóliton em modelos com não linearidade cúbica. É feito um estudo para investigar a propagação de um elétron se movendo em uma rede FPU, e investigar a ocorrência do par elétron-sóliton e sua dependência da condição inicial e da interação elétron-fônon. Para esse problema, a condição inicial para a posição e a velocidade dadas é: $q_n(t = 0) = 0$ e $p_n(t = 0) = v_0\delta_{n,N/2}$, para essas condições iniciais, é excitado os modos solitônicos não lineares que o modelo cúbico pode exibir. Dadas essas condições, tendo conhecimento da força inicial e conseqüentemente a aceleração inicial. Após um intervalo de tempo Δt , é feito o uso da Eq.(3.22) para calcular as novas posições, com isso, é usada a equação de movimento de Newton para obter uma nova força, de posse desta quantidade, é possível calcular uma nova aceleração. Por fim, com o uso da Eq.(3.23) para fazer uma correção na velocidade usando a média das acelerações. Esse método pode ser usado recursivamente para obter a posição e a velocidade no tempo t . Como as massas são todas iguais, o problema estudado nesta tese, o método é usado para calcular a posição e o momento no tempo t .

Os parâmetros usados para fazer os cálculos foram um passo no tempo na ordem de $\Delta t \approx 2 \times 10^{-3}$ com o número de termos na expansão de Taylor do operador de evolução temporal da ordem de $n_0 = 10$. A análise será feita seguindo a propagação do elétron e da deformação da rede. O estudo da propagação do elétron será feita usando a grandeza n_e , definida por:

$$n_e = \sum_n (n - N/2)|f_n(t)|^2. \quad (3.24)$$

Foi calculada a velocidade eletrônica (V_e) usando um ajuste linear da curva $n_e \times t$. A deformação pode ser estudada usando a probabilidade de deformações Π_n , determinada da seguinte forma:

$$\Pi_n = \frac{A_n}{\sum_n A_n}, \quad (3.25)$$

onde $A_n = (1 - e^{-(q_n - q_{n-1})})^2$. De forma similar que foi feita na parte eletrônica, calculou-se a propagação do centroide da deformação da rede n_L , dada por:

$$n_L = \sum_n (n - N/2)\Pi_n. \quad (3.26)$$

Por fim, foi obtida a velocidade das deformações da rede (V_L) fazendo um ajuste linear na curva $n_L \times t$.

3.3 Resultados e Discussões

Nesta seção será feita a análise dos resultados sobre a dinâmica elétron-rede para o modelo cúbico não linear, para isso, foi considerado uma rede unidimensional de

$N = 10^5$ sítios, mas por conveniência numérica, inicialmente foi considerado um tamanho de $N_0 = 200$ sítios, a medida que a função de onda eletrônica (e/ou as vibrações da rede) chegam ao limite da cadeia, ela é auto-expandida, ou seja, o valor de N_0 é aumentado.

Na Fig. 20 foi plotado a velocidade do elétron e da rede em relação ao acoplamento elétron-rede com a velocidade inicial (v_0) variando de 0.5 até 1.5. Examinado esses resultados, é possível ver que a V_L se mantém aproximadamente constante, ou seja, V_L independe do acoplamento elétron-rede. Outra circunstância que pode ser observada é uma certa dependência da amplitude de V_L da velocidade inicial [106]. Isso indica o tipo de não-linearidade que foi considerada neste modelo, ou seja, redes com não-linearidade cúbica que foram iniciadas por um pulso promovem o aparecimento de um modo solitônico estável não linear [107]. Com a análise da velocidade eletrônica, representada pela linha pontilhada, é constatado a dependência de V_e da interação elétron-rede e da velocidade inicial. V_e e V_L apresentam em sua maioria medidas muito diferentes para diversos valores de α e v_0 , isso indica que o elétron e o modo solitônico se propagam com velocidades divergentes.

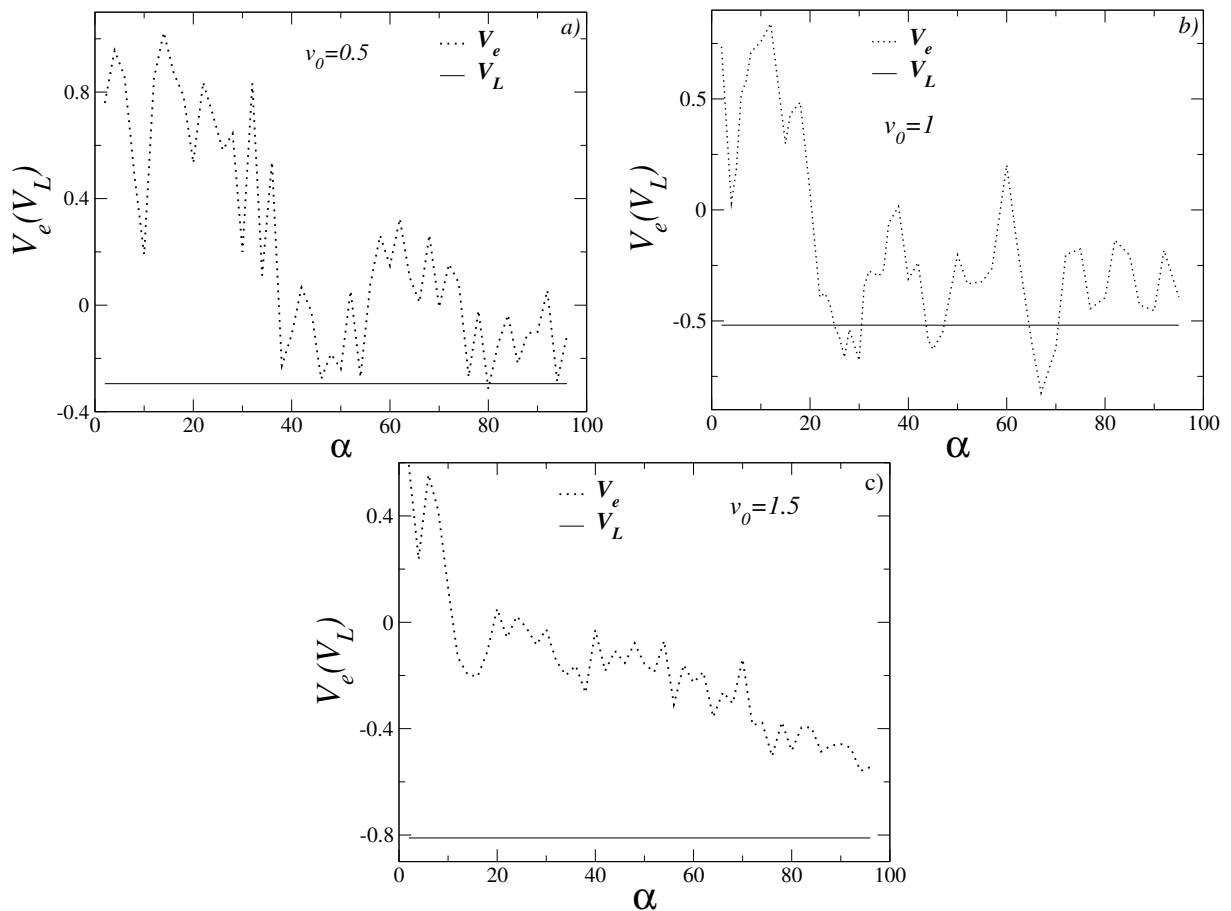


Figura 20. Velocidade do elétron (V_e) e da rede (V_L) versus o acoplamento elétron-rede (α) para a) $v_0 = 0.5$, b) $v_0 = 1$ e c) $v_0 = 1.5$. As respectivas curvas das velocidades foram obtidas fazendo um ajuste linear nas curvas de $n_e \times t$ (e $n_L \times t$) para um tempo máximo de 10^4 unidades de tempo.

Na Fig. 21 foi trocado o sinal da velocidade inicial em comparação com a Fig. 20, feito isso, é possível notar que os sinais das velocidades V_e e V_L da Fig. 21 são invertidos se comparados com os da Fig. 20. Portanto, é notório que se trata de uma causa direta da mudança de v_0 . Conseqüentemente, a velocidade da excitação solitônica depende da magnitude e do sinal do impulso inicial.

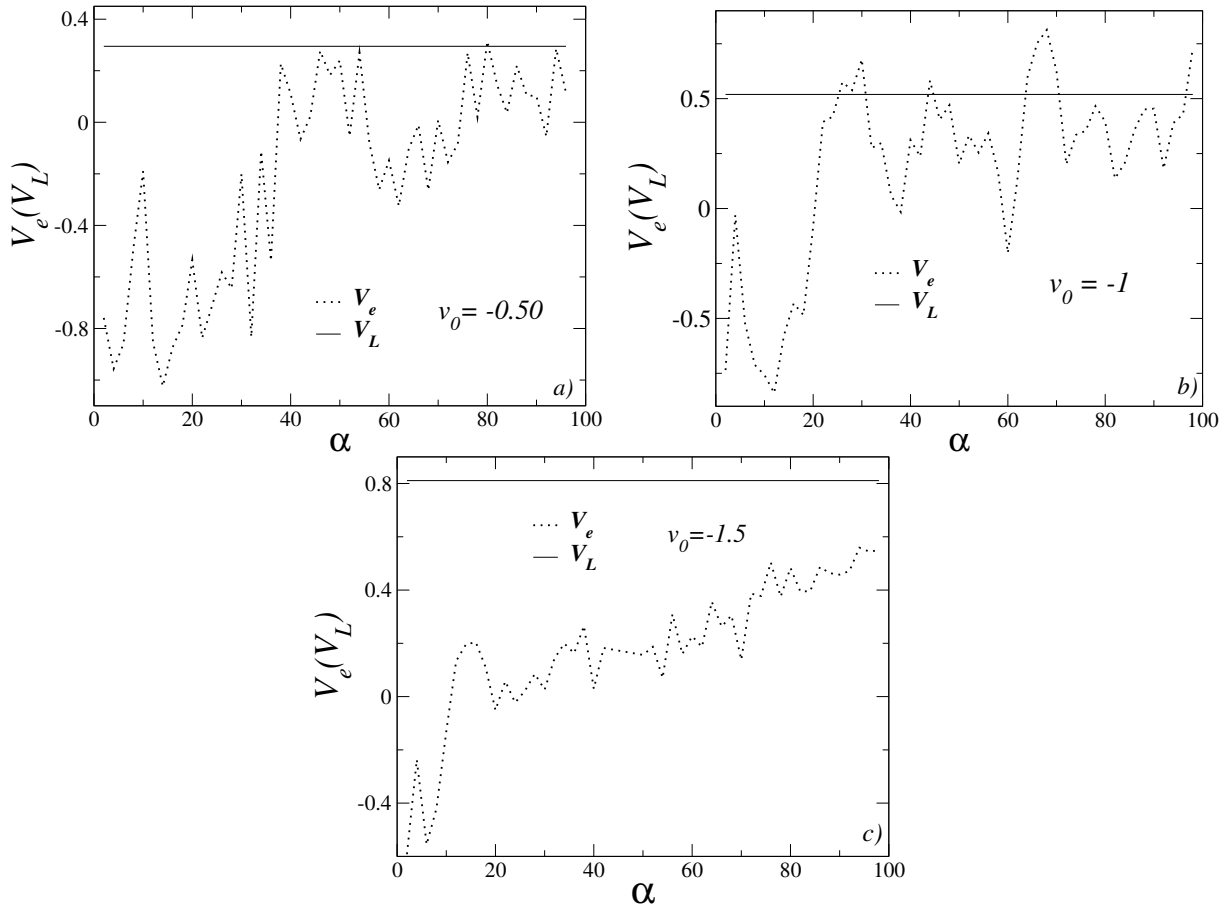


Figura 21. Velocidade do elétron (V_e) e da rede (V_L) versus o acoplamento elétron-rede (α) para a) $v_0 = -0.5$, b) $v_0 = -1$ e c) $v_0 = -1.5$. Resultados para V_e e V_L sob condições iniciais em que a v_0 é negativa.

Na Fig. 22 foi feito o cálculo da distância normalizada entre o elétron e as vibrações da rede (D_{e-L}/D_m), dada por: $D_{e-L} = |n_e(t) - n_L(t)|_{t \approx t_m}$, onde D_m representa o valor máximo de D_{e-L} . Examinando esses resultados, é possível observar que a distância normalizada entre o elétron e as deformações da rede se mantêm separados para muitos valores de α . Se esses resultados forem comparados com os das Figs. 20 e 22 é possível verificar que em regiões onde V_e e V_L são próximas, a distância D_{e-L}/D_m tende à zero.

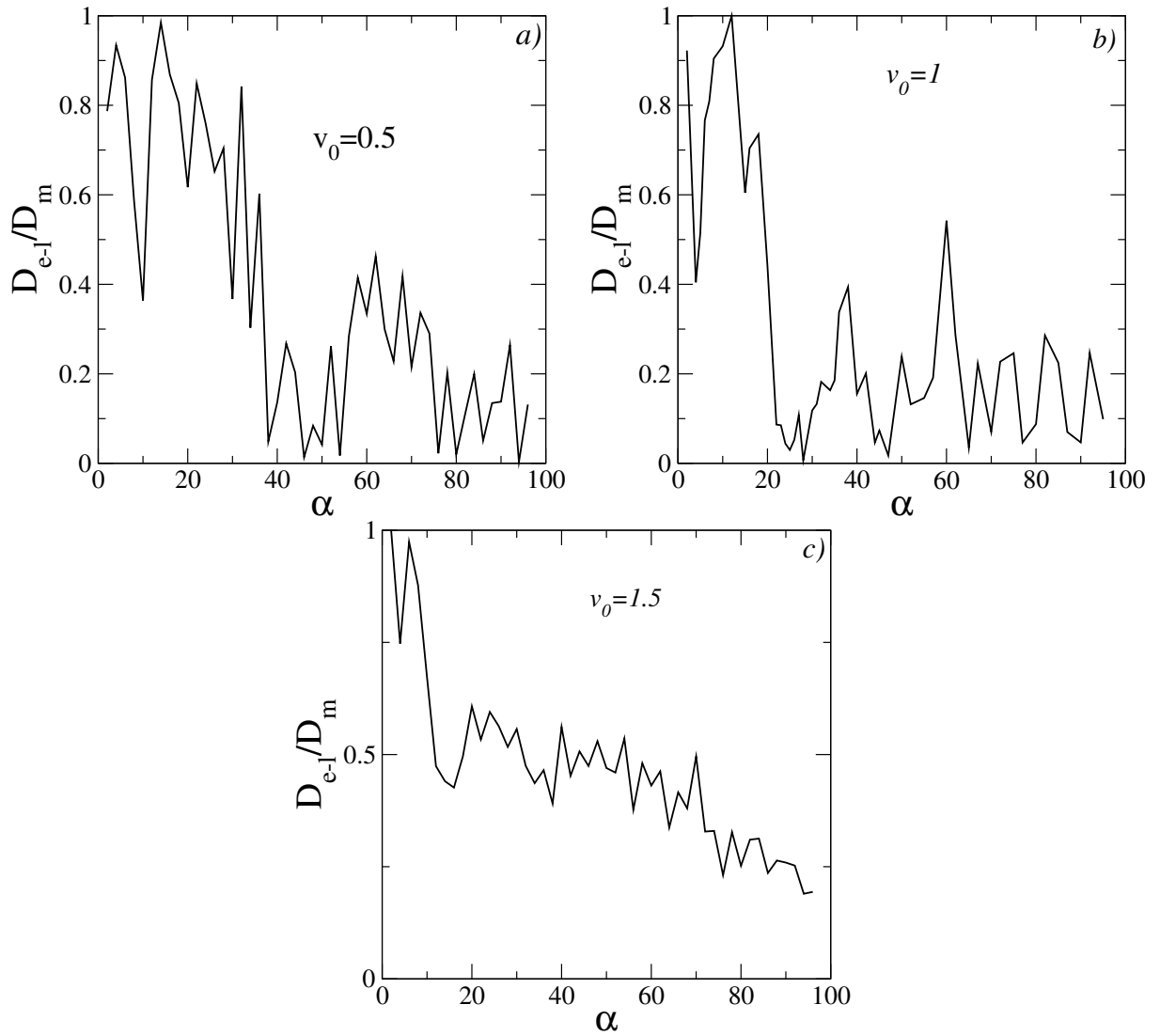


Figura 22. Distância normalizada entre o elétron e a deformação da rede versus a interação elétron-rede (α) para a) $\nu_0 = 0.5$, b) $\nu_0 = 1$ e c) $\nu_0 = 1.5$.

Comportamento semelhante pode ser verificado quando é feita a análise da Fig. 23 e a comparada com a Fig. 21. Os resultados apresentados até aqui sugerem que o par elétron-rede pode existir apenas por alguns pequenos intervalos específicos. Para a maioria dos valores de α , os resultados sugerem que a função de onda do elétron e a deformação da rede são mantidas separadas.

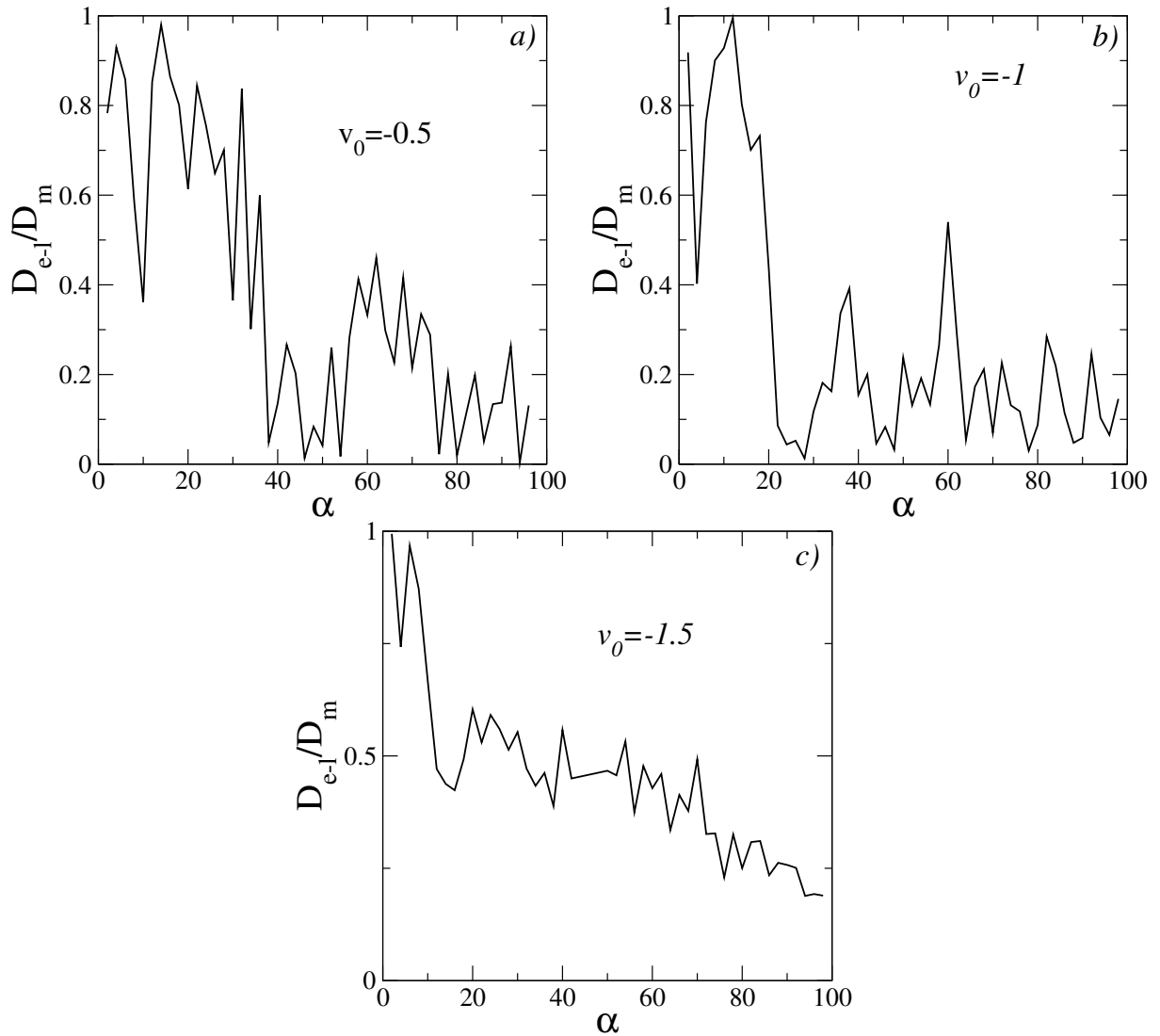


Figura 23. Distância normalizada entre o elétron e a deformação da rede versus a interação elétron-rede (α) para a) $v_0 = -0.5$, b) $v_0 = -1$ e c) $v_0 = -1.5$.

Na Fig. 24 foi feito um gráfico que mostra a distribuição de *hopping* ao longo do tempo e espaço para $\alpha = 5$ (elétron distante do modo solitônico) e $\alpha = 25$ (elétron próximo do modo solitônico) considerando uma velocidade inicial de $v_0 = 1$. Para $\alpha = 5$, a distribuição de *hopping* é cerca de -1 em grande parte da rede e, em uma pequena região da rede, a intensidade do *hopping* mostra um crescimento discreto. Para $\alpha = 25$, é obtido um comportamento semelhante a da distribuição para $\alpha = 5$, uma diferença é notada na intensidade do *hopping* que é cerca de 8, ou seja, muito maior em comparação com o caso analisado anteriormente. A principal causa desse efeito é a magnitude do acoplamento elétron-rede ser muito mais intenso. Essa região para $\alpha = 25$ é exatamente onde se tem a deformação solitônica. Esse tipo de “onda de *hopping*” promove o aprisionamento de uma fração finita da função de onda. No entanto, a quantidade da função de onda capturada pelo “perfil de *hopping*” depende do valor de α e também de v_0 .

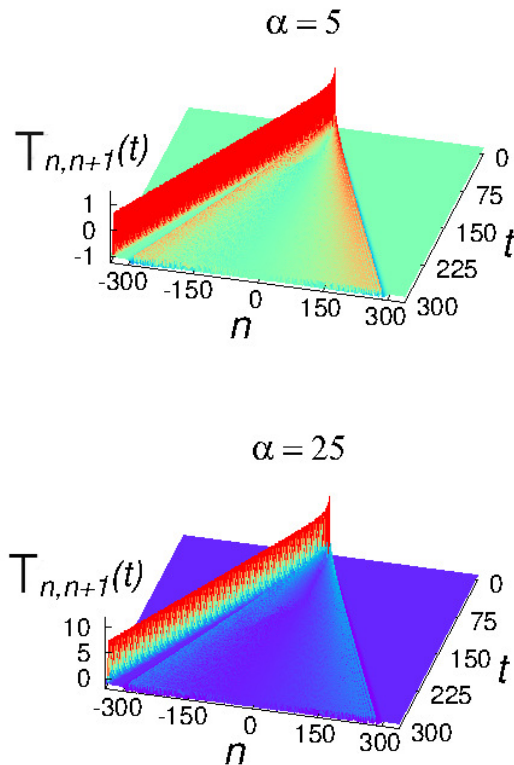


Figura 24. O *hopping* $T_{n+1,n}$ versus t e n para $\alpha = 5$ e $\alpha = 25$. O *hopping* tem comportamento diferente se considerado diferentes intensidades para o acoplamento elétron-rede.

Na Fig. 25 foi calculado a fração da função de onda, dada por: ($F_{max} = [|f_n(t \approx t_m)|^2]_{max}$) versus o acoplamento elétron-rede α . Com a análise do item b), onde $v_0 = 1$, o valor de $F_{max}(\alpha = 5)$ é muito inferior se comparado com $F_{max}(\alpha = 25)$, por exemplo. Examinado a região onde α varia no intervalo de [24-30], o “perfil de *hopping*” captura cerca de 40% da função de onda. Observando essa mesma região nas Figs. 20 e 22, é possível ver que $V_e \approx V_L$ e $D_{e-L}/D_m \rightarrow 0$. Agora, tomando $\alpha = 10$ e mantendo $v_0 = 1$, pode-se verificar que V_e e V_L assumem valores muito diferentes e a distância normalizada foi máxima. Portanto, averiguando esses resultados, eles indicam uma repulsão entre o elétron e a deformação da rede. Ao analisar os cálculos de F_{max} para este caso, é possível ver que a deformação da rede foi incapaz de capturar uma fração da função de onda, ou seja, $F_{max}(\alpha = 10, v_0 = 1) \approx 0$. Assim sendo, com base nas Figs. 24 e 25 conclui-se que para $\alpha < 20$ a distribuição de *hopping* dentro da cadeia é, em geral, incapaz de capturar uma fração dominante da função de onda eletrônica. Para $\alpha > 20$, dependendo do valor de v_0 , é possível promover a formação do par elétron-rede. Em geral, para aqueles intervalos em que $V_e \approx V_L$ e $D_{e-L}/D_m \rightarrow 0$, a fração F_{max} da função de onda eletrônica capturada pela deformação da rede foi grande. Nossos cálculos revelam que quando $V_e \approx V_L$ e $D_{e-L}/D_m \rightarrow 0$, a deformação da rede aprisionou pelo menos 30% do pacote de onda inicial.

Dependendo do valor de v_0 e α , cerca de 50% do estado eletrônico foi mantido em torno do pulso solitônico.

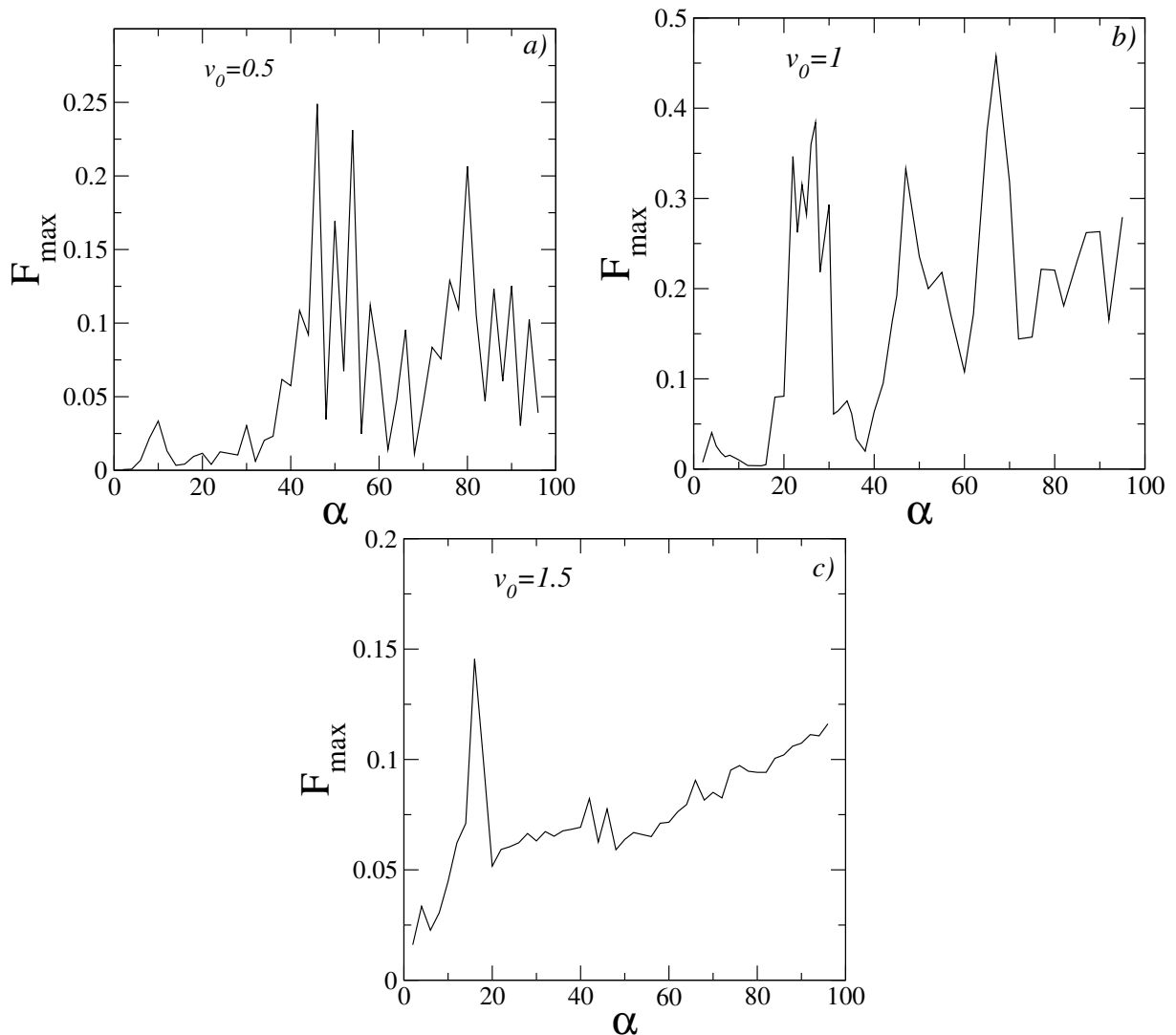


Figura 25. Fração da função de onda presa pela deformação da rede solitônica versus a interação elétron-rede (α) para a) $v_0 = 0.5$, b) $v_0 = 1$ e c) $v_0 = 1.5$.

Na Fig. 26 foi feita a análise da dinâmica elétron-sóliton considerando novas condições iniciais, por exemplo, é alterado o estado inicial do elétron, que agora será dado por: $|\Psi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(t=0) |n\rangle$, onde $f_n(t=0) = \delta_{n,(N/2)-50}$. Assim, no mesmo tempo ($t=0$) a rede clássica é excitada usando $q_n(t=0) = 0$ e $p_n = v_0 \delta_{n,N/2}$ e o elétron é totalmente localizado a 50 sítios distantes do centro da rede. Feito isso, o elétron se espalhará livremente em torno da posição inicial nos tempos iniciais, enquanto o modo solitônico se propaga para o lado esquerdo. Para ilustrar a dinâmica eletrônica, é plotado nas Figs. 26 (a) e (b) a amplitude da função de onda $|f_n|^2$ versus t e $j = n - N/2$. Lembrando que a posição $j = n - N/2 = 0$ representa o centro da cadeia. Na ausência de interação elétron-sóliton ($\alpha = 0$), o pacote de ondas de elétrons se espalhará balisticamente até o limite da cadeia (ver Fig. 26 (a)). Na presença do acoplamento elétron-sóliton ($\alpha = 1$),

o elétron inicialmente se espalha na cadeia; no entanto, depois que o modo solitônico encontra o elétron, o pacote de ondas é levado para o lado esquerdo (ver Fig. 26 (b)). Na Fig. 26 (c), é possível ver o efeito do encontro elétron-sóliton na posição eletrônica ao longo do tempo. Para tempos iniciais, o centroide do elétron permanece fixo em cerca de -50 (o $n_e = 0$ representa o centro da cadeia; portanto, $n_e = -50$ é precisamente a posição que inicialmente o elétron é localizado). Para $t \approx 25$ o modo solitônico encontra o elétron e o arrasta para a esquerda (ver Fig. 26 (c)). É observado que, para $\alpha = 1$, a velocidade da deformação da rede e o pacote de ondas eletrônicas são aproximadamente os mesmos. Por fim, analisando a Fig. 26 (d), que para $\alpha = 1$ a distância normalizada entre sóliton e elétron é pequena, sugerindo assim a existência de um par elétron-sóliton. Portanto, para esta nova condição inicial, os resultados são qualitativamente semelhantes. Sempre que a excitação solitônica encontra um amplo pacote de ondas eletrônicas, ainda é possível estabelecer uma excitação elétron-sóliton e controlar efetivamente a propagação do elétron.

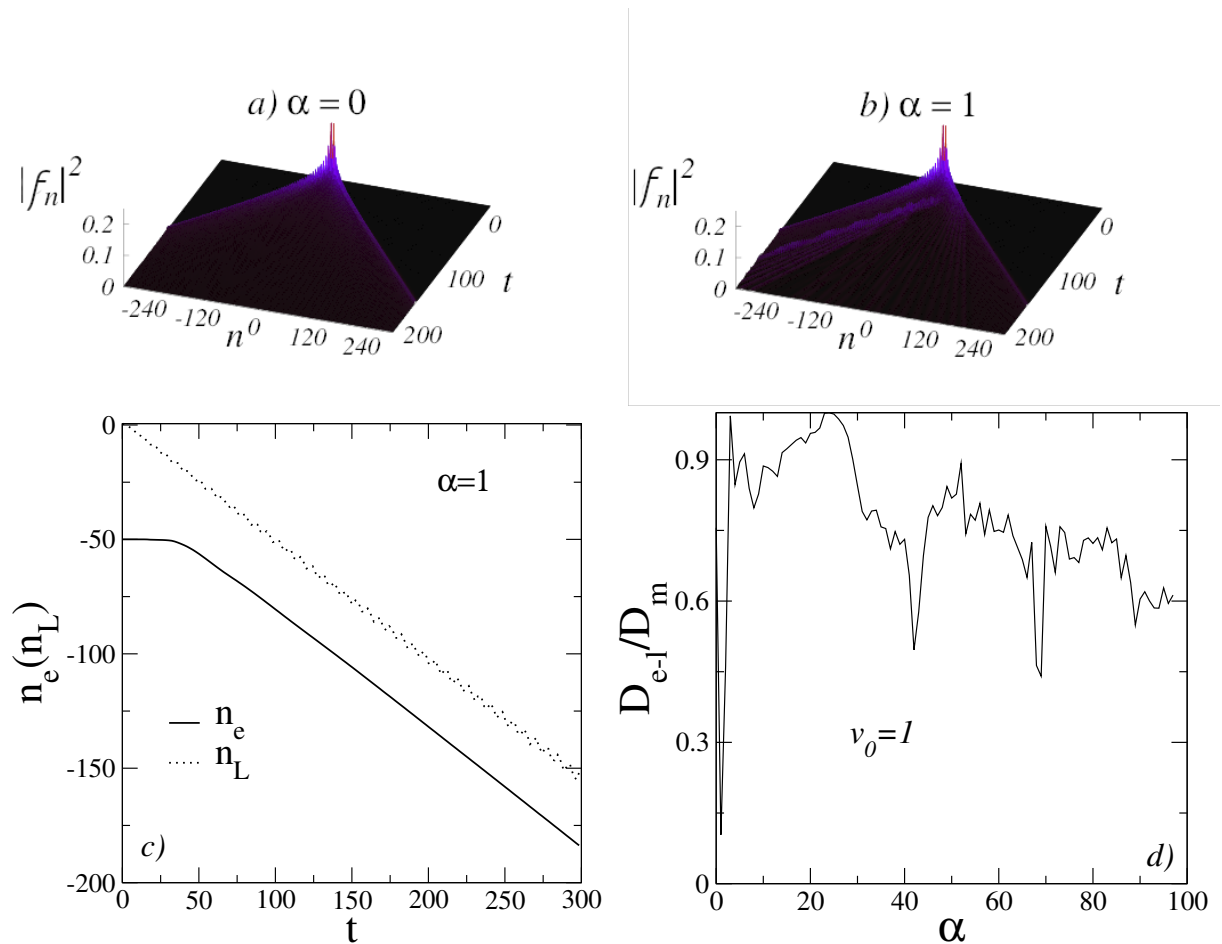


Figura 26. Dinâmica elétron-sóliton para: (a) ausência de acoplamento elétron-rede ($\alpha = 0$); (b) presença de acoplamento elétron-rede ($\alpha = 1$); (c) posição do elétron e da deformação da rede em função do tempo t para $\alpha = 0$ e (d) distância normalizada entre o elétron e a deformação da rede versus a interação elétron-rede.

Foi investigado o problema de dinâmica eletrônica em uma rede com não-linearidade cúbica. O método da expansão de Taylor do operador de evolução temporal foi usado para resolver as equações referentes a dinâmica eletrônica. Para as equações clássicas, responsáveis pela dinâmica da rede, foi usado o formalismo da velocidade de Verlet. Com o uso desse formalismo numérico, foi descrito em detalhes a formação do par elétron-rede e suas particularidades através do cálculo de diversas grandezas físicas. Foi investigado a possibilidade do par elétron-rede e sua dependência da velocidade inicial da rede e do acoplamento elétron-rede. Fazendo a análise dos resultados, é possível observar que eles indicam a condição necessária para promover a dinâmica elétron-sóliton. Foi discutido a fração da função de onda eletrônica capturada pelas deformações da rede. O *hopping* eletrônico versus o tempo e a posição da rede foi investigado. Com o estudo da forte interação elétron-rede, o perfil de *hopping* exibe um pico intenso que facilita o controle de elétrons. Os resultados demonstram que os pares elétron-sóliton ocorrem para alguns valores específicos de α e v_0 . Portanto, os cálculos indicam que a fenomenologia da propagação elétron-sóliton é um efeito raro. Para obter um perfil de dinâmica cooperativa envolvendo o elétron e o pulso solitônico próximos com a mesma velocidade, é preciso ajustar v_0 e α em pequenos intervalos específicos.

4 Estudo da propagação do par Mágnon-Sóliton em uma cadeia de Morse

4.1 Introdução

Nos últimos anos, há uma produção significativa de trabalhos sobre a dinâmica do mágnon acoplado à rede. Na pesquisa conduzida por Chen *et al.* [108], a propagação do mágnon foi investigada usando uma estrutura do método Boltzmann que incorpora a interação mágnon-fônon e diversos termos de espalhamento. As equações efetivas foram resolvidas, e os autores detalharam alguns fenômenos anormais observados em vários experimentos. No estudo de Zhang *et al.* [109], foi demonstrado que o acoplamento mágnon-fônon controla o efeito Hall térmico em uma rede quadrada ferromagnética com interação Dzyaloshinskii-Moriya. Sasaki *et al.* [110] explorou a possibilidade de usar SAW para controlar a magnetização de um filme ferromagnético de *Ni*. Li *et al.* [111] relataram a existência da formação coletiva de pares mágnon-fônon antiferromagnéticos no isolante Cr_2O_3 . Morais *et al.* [112] investigaram a propagação de estados de mágnon acoplados aos modos harmônicos de uma rede linear. Eles consideraram uma aproximação adiabática para deduzir uma equação quântica eficaz para descrever a dinâmica do mágnon, demonstrando a existência de uma transição de auto-aprisionamento para o estado de mágnon.

Em outro estudo, a propagação do mágnon foi investigada em um potencial Fermi-Pasta-Ulam. A dinâmica de *spin* foi examinada utilizando um Hamiltoniano quântico de Heisenberg com o estado fundamental ferromagnético. A interação mágnon-rede foi incorporada considerando os termos da interação *spin-spin* em função da distância entre eles. Ao resolver as equações que governam a dinâmica do problema, foi demonstrada a existência do par mágnon-sóliton [113]. Além disso, a dinâmica do mágnon foi estudada ao formular o Hamiltoniano de Heisenberg em uma cadeia de Morse não linear. Os autores mostraram que a deformação da rede incorpora uma fração finita da função de onda de *spin* no regime robusto de acoplamento *spin-rede*, resultando na geração de uma excitação mágnon-rede móvel [114].

Neste trabalho, o problema da dinâmica do mágnon em uma rede de Morse foi investigado. O acoplamento *spin-spin* foi realizado utilizando o modelo de Heisenberg, em que a intensidade da interação *spin-spin* é ajustada por uma exponencial dependente da distância entre os *spins* vizinhos mais próximos. Essa estrutura proporciona uma interação *spin-rede* eficaz, e um único parâmetro ajustável controla a intensidade dessa interação. A dinâmica do par mágnon-rede foi explorada considerando uma ampla gama de condições iniciais. Os cálculos indicam que a formação do par mágnon-rede depende

significativamente da largura da condição inicial. Além disso, foi examinada a dependência da propagação do par mágnon-rede em relação à diferença nas escalas de tempo entre a propagação do *spin* e da rede. Os resultados sugerem que a formação de pares mágnon-rede ocorre para uma pequena quantidade de interação mágnon-rede à medida que a diferença na escala de tempo aumenta.

4.2 Modelo e Formalismo

O modelo utilizado neste trabalho constitui-se de uma rede unidimensional de *spin* 1/2 em uma cadeia de Morse não linear [115]. Logo, o Hamiltoniano completo do sistema é $H = H_{spin} + H_{rede}$. No qual, H_{spin} se trata do Hamiltoniano de Heisenberg dado por:

$$H_{spin} = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}, \quad (4.1)$$

onde a interação entre os *spins* n e $n + 1$ depende exponencialmente da distância de primeiros vizinhos dos sítios da rede, ou seja,

$$J_{n,n+1} = J e^{-\alpha(X_{n+1}-X_n)}, \quad (4.2)$$

no qual X_n é o deslocamento do *spin* n da sua posição de equilíbrio. É possível observar uma dependência da distância entre dois sítios vizinhos na rede de Morse. O parâmetro α determina a intensidade do acoplamento entre o mágnon e a rede. Enfatizando que se trata de um sistema com uma geometria unidimensional. Portanto, sem vibrações na rede, todos os *spins* estão em posições igualmente espaçadas (em equilíbrio, a distância entre os *spins* vizinhos mais próximos é o espaçamento da rede, um parâmetro adimensional $l_s = 1$). Porém, o modelo considerará que os *spins* podem se mover em torno de sua posição de equilíbrio. O movimento espacial dos *spins* produz variações no valor da interação *spin-spin*. E será considerado que essas variações seguem essa dependência exponencial mostrada anteriormente. O termo H_{rede} é um Hamiltoniano clássico tipo Morse que descreve os deslocamentos longitudinais em relação às posições de equilíbrio e modifica os comprimentos de ligação entre os sítios. Portanto, a dinâmica da rede pode ser modelada usando os potenciais de Morse [116, 117, 118] descritos da seguinte forma:

$$H_{rede} = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{p_n^2}{2M_n} + D[1 - \exp(-B(X_n - X_{n-1}))]^2 \right\}, \quad (4.3)$$

onde p_n são os momentos das moléculas quando excitadas, M_n são as massas destas referidas moléculas. A constante D aponta a energia de desintegração de uma ligação e B representa a rigidez do potencial de Morse.

A partir deste ponto será deduzido explicitamente as equações que governam a dinâmica do mágnon e as velocidades de vibração da rede. A Eq.(4.1) pode ser reescrita

como

$$H_{spin} = \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + S_n^z S_{n+1}^z]. \quad (4.4)$$

Sabendo que

$$S_n^x = \frac{1}{2}(S_n^+ + S_n^-) \text{ e } S_n^y = \frac{-i}{2}(S_n^+ - S_n^-), \quad (4.5)$$

com isso, substituindo na Eq.(4.4)

$$\begin{aligned} H_{spin} &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left[S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{4}(S_n^+ + S_n^-)(S_{n+1}^+ + S_{n+1}^-) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4}(S_n^+ - S_n^-)(S_{n+1}^+ - S_{n+1}^-) \right] \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left\{ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{4} [S_n^+ S_{n+1}^+ + S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+ \right. \\ &\quad \left. + S_n^- S_{n+1}^- - S_n^+ S_{n+1}^+ + S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+ - S_n^- S_{n+1}^-] \right\} \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left\{ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{4} (2S_n^+ S_{n+1}^- + 2S_n^- S_{n+1}^+) \right\} \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left\{ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right\}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Atuando H_{spin} em um estado fundamental ferromagnético denotado como $|\phi_l\rangle$, no qual $|\phi_l\rangle = S_l^+ |\phi_0\rangle$, é obtido que

$$\begin{aligned} H_{spin} |\phi_l\rangle &= - \underbrace{\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_l\rangle}_{\text{I}} - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\phi_l\rangle}_{\text{II}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\phi_l\rangle}_{\text{III}}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Manipulando o primeiro termo (I)

$$\text{I} = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_l\rangle = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z S_l^+ |\phi_0\rangle.$$

Adicionando o termo nulo destacado na equação seguinte

$$\begin{aligned} \text{I} &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} (S_n^z S_{n+1}^z S_l^- - \underbrace{S_n^z S_l^+ S_{n+1}^z}_{\text{II}} + \underbrace{S_n^z S_l^+ S_{n+1}^z}_{\text{III}}) |\phi_0\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^z (S_{n+1}^z S_l^+ - S_l^+ S_{n+1}^z) + S_n^z S_l^+ S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle. \end{aligned}$$

Usando a relação de comutação $[S_k^z, S_l^+] = S_k^+ \delta_{k,l}$, tem-se

$$\text{I} = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^z S_{n+1}^+ \delta_{n+1,l} + S_n^z S_l^+ S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle.$$

Adicionando mais um termo nulo

$$\begin{aligned} \text{I} &= \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^z S_{n+1}^+ \delta_{n+1,l} + S_n^z S_l^+ S_{n+1}^z - \underbrace{S_l^+ S_n^z S_{n+1}^z}_{\text{}} + \underbrace{S_l^+ S_n^z S_{n+1}^z}_{\text{}}] |\phi_0\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^z S_{n+1}^+ \delta_{n+1,l} + (S_n^z S_l^+ - S_l^+ S_n^z + S_l^+ S_n^z) S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle. \end{aligned}$$

Usando novamente a relação de comutação

$$\begin{aligned} \text{I} &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^z S_{n+1}^+ \delta_{n+1,l} + (S_n^+ \delta_{n,l} + S_l^+ S_n^z) S_{n+1}^z] |\phi_0\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^+ \delta_{n+1,l} |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ \delta_{n,l} S_{n+1}^z |\phi_0\rangle - \\ &\quad - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_l^+ S_n^z S_{n+1}^z |\phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Nas funções deltas presente na Eq.(4.8) deve-se selecionar apenas os termos não nulos, ou seja, toma-se que $n+1=l \Rightarrow n=l-1$ e $n=l$, assim,

$$\text{I} = -J_{l-1,l} S_{l-1}^z S_l^+ |\phi_0\rangle - J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^z |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_l^+ S_n^z S_{n+1}^z |\phi_0\rangle \quad (4.9)$$

Como no estado fundamental todos os *spins* estão alinhados na direção negativa de z , o operador S_n^z aplicado ao estado $|\phi_0\rangle$ assume o valor máximo de $-S$ para qualquer sítio da rede diferente de l . Assim,

$$\text{I} = J_{l-1,l} S |\phi_l\rangle - J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^z |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^+ |\phi_0\rangle. \quad (4.10)$$

Adicionando mais um termo nulo

$$\begin{aligned} \text{I} &= J_{l-1,l} S |\phi_l\rangle + J_{l,l+1} (S_l^+ S_{l+1}^z - \underbrace{S_{l+1}^z S_l^+}_{\text{}} + \underbrace{S_{l+1}^z S_l^+}_{\text{}}) |\phi_0\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 S_l^+ |\phi_0\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 |\phi_l\rangle + J_{l-1,l} S |\phi_l\rangle - J_{l,l+1} S_{l+1}^z |\phi_l\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2 |\phi_l\rangle + S (J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) |\phi_l\rangle \\ &= E_0 |\phi_l\rangle + S (J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) |\phi_l\rangle, \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde $E_0 = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S^2$. Agora, manipulando o segundo termo (II) da Eq.(4.7)

$$\text{II} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\phi_l\rangle.$$

Sabendo que $|\phi_l\rangle = S_l^+ |\phi_0\rangle$ e substituindo na equação anterior, é obtido que

$$\text{II} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ S_l^+ |\phi_0\rangle. \quad (4.12)$$

Somando o termo nulo $-S_{n+1}^+ S_n^- S_l^+ + S_{n+1}^+ S_n^- S_l^+$ e fazendo uso de $[S_l^+, S_w^-] = 2S_l^z \delta_{l,w}$, tem-se

$$\begin{aligned}
\text{II} &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^- S_{n+1}^+ S_l^+ - S_{n+1}^+ S_n^- S_l^+ + S_{n+1}^+ S_n^- S_l^+] |\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \underbrace{[(S_n^- S_{n+1}^+ - S_{n+1}^+ S_n^-)]}_{-2S_{n+1}^z \delta_{n,n+1}} S_l^+ + S_{n+1}^+ (-2S_n^z \delta_{n,l} + S_l^+ S_n^-) |\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [(-2S_{n+1}^z \delta_{n,n+1} S_l^+ - 2S_{n+1}^+ S_n^z \delta_{n,l}) |\phi_0\rangle + S_{n+1}^+ S_l^+ S_n^- |\phi_0\rangle]. \quad (4.13)
\end{aligned}$$

Mas $S_n^- |\phi_0\rangle = 0$ e $\delta_{n,n+1} = 0$, $\forall n$, assim,

$$\begin{aligned}
\text{II} &= \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_{n+1}^+ S_n^z \delta_{n,l} |\phi_0\rangle \\
&= J_{l,l+1} S_{l+1}^+ S_l^z |\phi_0\rangle \\
&= -J_{l,l+1} S_{l+1}^+ (S |\phi_0\rangle) \\
&= -J_{l,l+1} S (S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle) \\
&= -J_{l,l+1} S |\phi_{l+1}\rangle, \quad (4.14)
\end{aligned}$$

no qual foi usado que: $S_l^z |\phi_0\rangle = -S |\phi_0\rangle$ e $S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle = |\phi_{l+1}\rangle$. Por fim, manipulando o terceiro termo (III) da Eq.(4.7)

$$\begin{aligned}
\text{III} &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\phi_l\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- S_l^+ |\phi_0\rangle. \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Somando o termo nulo $-S_n^+ S_l^+ S_{n+1}^- + S_n^+ S_l^+ S_{n+1}^-$, tem-se

$$\begin{aligned}
\text{III} &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^+ S_{n+1}^- S_l^+ - S_n^+ S_l^+ S_{n+1}^- + S_n^+ S_l^+ S_{n+1}^-] |\phi_0\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^+ (S_{n+1}^- S_l^+ - S_l^+ S_{n+1}^-) |\phi_0\rangle + S_n^+ S_l^+ (S_{n+1}^- |\phi_0\rangle)]. \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Sabendo que $[S_{n+1}^+, S_l^-] = 2S_{n+1}^z \delta_{n+1,l}$ e $S_{n+1}^- |\phi_0\rangle = 0$, é obtido que

$$\text{III} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} [S_n^+ (-2S_l^z \delta_{n+1,l}) |\phi_0\rangle]. \quad (4.17)$$

Para esse caso, para selecionar os termos não nulos é tomado na delta de Kronecker que $n = l - 1$, assim,

$$\begin{aligned}
\text{III} &= J_{l-1,l} S_{l-1}^+ (S_l^z |\phi_0\rangle) = -J_{l-1,l} S_{l-1}^+ (S |\phi_0\rangle) \\
&= -J_{l-1,l} S (S_{l-1}^+ |\phi_0\rangle) = -J_{l-1,l} S |\phi_{l-1}\rangle, \quad (4.18)
\end{aligned}$$

onde foi usado que $S_{l-1}^+ |\phi_0\rangle = |\phi_{l-1}\rangle$ e $S_l^z |\phi_0\rangle = -S |\phi_0\rangle$. Portanto, a ação do Hamiltoniano H_{spin} sobre o estado $|\phi_l\rangle$ é dado por

$$H_{spin} |\phi_l\rangle = E_0 |\phi_l\rangle + S[(J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) |\phi_l\rangle - J_{l,l+1} |\phi_{l+1}\rangle - J_{l-1,l} |\phi_{l-1}\rangle]. \quad (4.19)$$

A Eq.(4.19) mostra que um desvio no sítio l não fica localizado em l , ou seja, existe uma propagação pela rede através dos seus vizinhos $l+1$ e $l-1$. Então, como existe interação entre os *spins*, uma excitação inicial de um *spin* para cima, depois de decorrido um tempo t , haverá uma probabilidade de outro *spin* esteja para cima. Portanto, essa propagação demonstra a excitação coletiva do sistema, formando a onda de *spin*. Outra conclusão que se pode obter analisando a Eq.(4.19) é que $|\phi_l\rangle$ não é um autoestado de H_{spin} , pois um desvio no sítio l não fica localizado em l . Logo, para construir o estado desta configuração, defini-se $|\psi\rangle$ como o estado de um mágnon, isto é,

$$|\psi\rangle = A \sum_{l=1}^N f_l |\phi_l\rangle, \quad (4.20)$$

onde f_l são as amplitudes de probabilidade de acontecer um desvio no sítio l . É possível demonstrar que $|\psi\rangle$ é autoestado de H_{spin} usando a equação de Schrödinger ($H_{spin} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$), logo,

$$\begin{aligned} H_{spin} |\psi\rangle &= A \sum_{l=1}^N f_l (H_{spin} |\phi_l\rangle) \\ &= A \sum_{l=1}^N [E_0 + S(J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) f_l |\phi_l\rangle - S J_{l,l+1} f_l |\phi_{l+1}\rangle \\ &\quad - S J_{l-1,l} f_l |\phi_{l-1}\rangle] = E |\psi\rangle, \end{aligned} \quad (4.21)$$

ou ainda,

$$\sum_{l=1}^N S[(J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) f_l |\phi_l\rangle - J_{l,l+1} f_l |\phi_{l+1}\rangle - J_{l-1,l} f_l |\phi_{l-1}\rangle] = \epsilon \sum_{l=1}^N f_l |\phi_l\rangle, \quad (4.22)$$

onde $\epsilon = E - E_0$. Considerando $S = 1/2$ (ferromagnetismo) e multiplicando a equação anterior por $\langle \phi_j |$, é possível obter

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} [(J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) f_l \langle \phi_j | \phi_l\rangle - J_{l,l+1} f_l \langle \phi_j | \phi_{l+1}\rangle \\ - J_{l-1,l} f_l \langle \phi_j | \phi_{l-1}\rangle] = \epsilon \sum_{l=1}^N f_l \langle \phi_j | \phi_l\rangle, \end{aligned} \quad (4.23)$$

para $\langle \phi_j | \phi_l\rangle = \delta_{j,l} = 1$, se $j = l$, logo,

$$(J_{j-1,j} + J_{j,j+1}) f_j - J_{j-1,j} f_{j-1} - J_{j,j+1} f_{j+1} = 2\epsilon f_j. \quad (4.24)$$

Essa última equação se trata da relação de recorrência e com ela é possível obter a representação matricial do Hamiltoniano no subespaço formado por todos os estados de

um “*spin-flip*”. Também é possível obter os autovalores e autovetores do Hamiltoniano com o uso de rotinas numéricas apropriadas. Fazendo uso da Eq.(4.2) e considerando $\epsilon = i\hbar/dt$

$$i \frac{df_j(t)}{dt} = \frac{\tau}{2} \left[\left(e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} + e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} \right) f_j(t) - e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} f_{j-1}(t) - e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} f_{j+1}(t) \right], \quad (4.25)$$

onde $\tau = J/(\hbar\Omega_{Morse})$ é o parâmetro de adiabaticidade, ele determina o grau de separação da escala de tempo entre os processos de mágnons (rápidos) e acústicos (lentos). $\Omega_{Morse} = \sqrt{2DB^2/M_n}$ é a frequência das oscilações harmônicas em torno do mínimo do potencial Morse. Aqui será usado $J = 0.1$, o que está alinhado com pesquisas anteriores [99, 119]. O valor de τ será ajustável, mas em trabalhos anteriores foi tipicamente escolhido em torno de 10 [113, 119] devido a diferenças nas escalas de tempo entre a propagação quântica e clássica. No entanto, será explorado os efeitos da variação de τ em torno deste valor. Agora, será deduzido as equações que regem as vibrações harmônicas da rede. Para isso, é necessário utilizar o formalismo de Hamilton, onde a taxa de variação do momento pode ser escrita da seguinte forma: $\dot{p}_j = -\partial \langle H \rangle / \partial X_j$, no qual $\langle H \rangle = \langle \Psi(t) | H | \Psi(t) \rangle$. Assim,

$$\begin{aligned} \dot{p}_j &= -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial X_j} = -\frac{\partial}{\partial X_j} \langle H_{spin} + H_{rede} \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial X_j} \left[\sum_l \sum_j [(E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})) f_l^* f_j \langle \phi_l | \phi_j \rangle - S J_{j,j+1} f_l^* f_j \langle \phi_l | \phi_{j+1} \rangle - S J_{j-1,j} f_l^* f_j \langle \phi_l | \phi_{j-1} \rangle] \right] - \frac{\partial}{\partial X_j} \langle \Psi(t) | \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{p_j}{2M_j} + D[1 - \exp(-B(X_j - X_{j-1}))]^2 \right\} | \Psi(t) \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial X_j} \left[\sum_l \sum_j [(E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})) f_l^* f_j \delta_{l,j} - S J_{j,j+1} f_l^* f_j \delta_{l,j+1} - S J_{j-1,j} f_l^* f_j \delta_{l,j-1}] \right] - \frac{\partial}{\partial q_j} \langle \Psi(t) | \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{p_j}{2M_j} + D[1 - \exp(-B(X_j - X_{j-1}))]^2 \right\} | \Psi(t) \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial X_j} \left[\sum_j [(E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})) f_j^* f_j - S J_{j,j+1} f_{j+1}^* f_j - S J_{j-1,j} f_{j-1}^* f_j] \right] - \frac{\partial}{\partial X_j} \langle \Psi(t) | \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{p_j}{2M_j} + D[1 - \exp(-B(X_j - X_{j-1}))]^2 \right\} | \Psi(t) \rangle, \end{aligned}$$

onde foi usado que $|A|^2 = 1$, ou seja, a função de onda é normalizada ($\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$). Substituindo a Eq.(4.2) na equação anterior,

$$\begin{aligned} \dot{p}_j &= -\frac{\partial}{\partial X_j} \left[\sum_j [E_0 f_j^* f_j + S J (e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} + e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)}) f_j^* f_j - S J e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} f_{j+1}^* f_j - S J e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} f_{j-1}^* f_j] \right] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial X_j} \langle \Psi(t) | \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{p_j^2}{2M_j} + D[1 - \exp(-B(X_j - X_{j-1}))]^2 \right\} | \Psi(t) \rangle. \quad (4.26) \end{aligned}$$

Nos termos referentes ao primeiro somatório é possível observar que os termos de ordem $j - 1$ e j contém a posição X_j , e serão submetidos a derivada parcial $\partial/\partial X_j$. Os termos

restantes do somatório não contém X_j e, portanto, suas derivadas se anulam. Para o segundo somatório, os termos de ordem j e $j + 1$ contém a posição X_j , assim, sabendo disso e calculando a derivada, a Eq.(4.26) toma a forma:

$$\begin{aligned} \dot{p}_j &= \alpha J S e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} (f_j^* f_j + f_{j-1}^* f_{j-1}) + \alpha J S e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} (f_j^* f_j + f_{j+1}^* f_{j+1}) \\ &\quad - \alpha J S e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} (f_{j+1}^* f_j + f_j^* f_{j+1}) + \alpha J S e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} (f_{j-1}^* f_j + f_j^* f_{j-1}) \\ &\quad + 2BD [[1 - e^{-(q_{n+1} - q_n)}] e^{-(q_{n+1} - q_n)} - [1 - e^{-(q_n - q_{n-1})}] e^{-B(q_n - q_{n-1})}]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Para que essas equações fiquem adimensionais, é usado a unidade de tempo $\Omega_{Morse}^{-1}(t \rightarrow \Omega_{Morse})$. A energia contém unidade de $(2D)$, no descocamento foi adotada a unidade de B^{-1} e a unidade de momento é $(\sqrt{2M_j D})^{-1}$ [120].

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X_j}{dt^2} &= \alpha J S e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} (f_j^* f_j + f_{j-1}^* f_{j-1}) + \alpha J S e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} (f_j^* f_j + f_{j+1}^* f_{j+1}) \\ &\quad - \alpha J S e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} (f_{j+1}^* f_j + f_j^* f_{j+1}) + \alpha J S e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} (f_{j-1}^* f_j + f_j^* f_{j-1}) \\ &\quad + [1 - e^{-(X_{j+1} - X_j)}] e^{-(X_{j+1} - X_j)} - [1 - e^{-(X_j - X_{j-1})}] e^{-(X_j - X_{j-1})}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Tomando $S = 1/2$, é obtido que

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X_j}{dt^2} &= \{1 - e^{-(X_{j+1} - X_j)}\} e^{-(X_{j+1} - X_j)} - \{1 - e^{-(X_j - X_{j-1})}\} e^{-(X_j - X_{j-1})} \\ &\quad + \frac{J\alpha}{2} \left[e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} (f_j^* f_j + f_{j-1}^* f_{j-1}) - e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} (f_j^* f_j + f_{j+1}^* f_{j+1}) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\alpha(X_{j+1} - X_j)} (f_{j+1}^* f_j + f_j^* f_{j+1}) - e^{-\alpha(X_j - X_{j-1})} (f_{j-1}^* f_j + f_j^* f_{j-1}) \right]. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Para resolver numericamente as Eqs.(4.25) e (4.29), é feito o uso de dois métodos. As equações que ditam a dinâmica do mágnon, o método escolhido foi o da expansão de Taylor de alta ordem, apresentado no Apêndice C. Para as equações clássicas, o método utilizado será o Verlet [105], apresentado no final da seção 3.2.

Os parâmetros utilizados para a realização destes cálculos foram um passo no tempo na ordem de $\Delta t \approx 1,0 \times 10^{-3}$ com $n_0 = 10$, que é o número de termos da expansão de Taylor do operador de evolução temporal. O intervalo de tempo máximo usado nos cálculos foi da ordem de $t_m = 1,0 \times 10^4$. As condições iniciais utilizadas no trabalho são: $f_j(t = 0) = A e^{(j - N/2)^2 / (4\sigma_S^2)}$, $X_j(t = 0) = 0$ e $p_j(t = 0) = v_0 e^{(j - N/2)^2 / (4\sigma_L^2)}$, onde A é a constante de normalização, v_0 é a velocidade inicial, σ_S e σ_L são as larguras das respectivas gaussianas. Para fazer a análise, as principais medidas que serão feitas são a propagação do mágnon, que pode ser observada usando a quantidade n_S que representa a posição média da excitação da onda de *spin*, onde é definida como

$$n_S(t) = \sum_j (j - N/2) |f_j(t)|^2. \quad (4.30)$$

As propriedades da rede podem ser analisadas usando a posição média da deformação da rede, definida da seguinte maneira

$$n_L(t) = \frac{\sum_j (j - N/2) [1 - e^{-(X_j - X_{j-1})}]^2}{\sum_j [1 - e^{-(X_j - X_{j-1})}]^2}. \quad (4.31)$$

Da mesma maneira que foi feita no Capítulo 3, para obter as curvas das velocidades do mágnon (V_S) e das deformações da rede (V_L), é feito um ajuste linear das curvas $n_S \times t$ e $n_L \times t$, respectivamente. Com a análise dessas grandezas, será verificado a existência do par mágnon-rede, que de maneira geral acontece quando $n_S \approx n_L$ e $V_S \approx V_L$. Outra grandeza em estudo é a propagação do modo solitônico ao longo da rede, que pode ser calculada da seguinte forma

$$Z_j = \frac{B_j}{\sum_j B_j}, \quad (4.32)$$

onde $B_j = [1 - e^{-(X_j - X_{j-1})}]^2$. Esta quantidade representa uma probabilidade generalizada de que ocorra deformação em torno do sítio j .

4.3 Resultados e Discussões

Na Fig. 27, foi feito o plote da deformação da rede Z_n para diversos valores do acoplamento mágnon-rede ($\alpha = 0, 1, 2, 3$), velocidades iniciais ($v_0 = 1$), $\sigma_S = 0.5$ e $\sigma_L = 0.5$. É possível notar que Z_n independe do valor de α , ou seja, a deformação da rede exibe um modo solitônico estável que se propaga ao longo da cadeia.

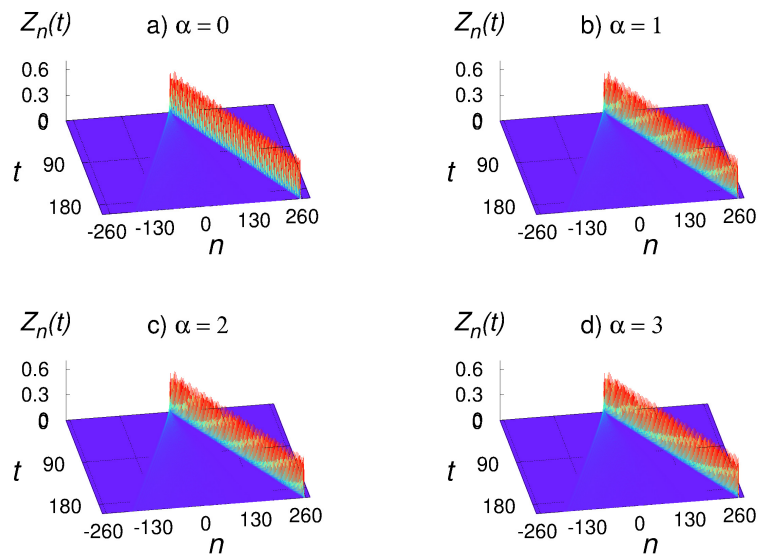


Figura 27. A deformação da rede Z_n versus t e n , onde $n = j - N/2 = 0$ representa o centro da cadeia. Os cálculos foram feitos para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 0,5$, $\tau = 10$ e $\alpha = 0, 1, 2, 3$

Para encontrar a velocidade do mágnon (V_S) e a velocidade da rede (V_L) em relação a α , como mostradas na Fig. 28, o ajuste linear das curvas $n_S \times t$ e $n_L \times t$ foi realizado nos últimos 20% do intervalo de tempo completo (t_m). Analisando esses resultados, nota-se que V_L é aproximadamente independente a α . Por outro lado, a propagação do *spin* depende

fortemente do parâmetro de interação *spin*-rede α . Como a deformação da rede é governada pela Eq.(4.29), é possível ver que quando α é pequeno, os dois primeiros termos dominam os termos que dependem diretamente de α e das funções de onda. Portanto, a velocidade do sóliton permanece aproximadamente constante, entretanto, quando α aumenta, os termos finais tornam-se mais significativos e têm maior impacto na propagação dos sólitons, causando um ligeiro aumento na velocidade. Por outro lado, o comportamento da dinâmica do *spin* é ditada pela Eq.(4.25), que mostra uma dependência significativa na magnitude de α tanto na diagonal (primeiro termo) quanto fora da diagonal (dois últimos termos). Como tal, era de fato esperado que o valor de α influenciasse a velocidade do mágnon. Ao analisar todas as curvas para vários dos τ considerados, há uma correspondência entre a velocidade do mágnon e da rede ($V_S \approx V_L$) para um valor específico de α . Este resultado sugere que para este valor particular de α , o mágnon e a deformação da rede viajam na mesma velocidade. É importante enfatizar que é a primeira indicação de que o mágnon e rede podem se mover em uma espécie de “propagação correlacionada” (como uma formação de par mágnon-rede). É possível ver também que à medida que o parâmetro τ aumenta, este valor de α em que as velocidades são iguais torna-se menor. Para compreender este

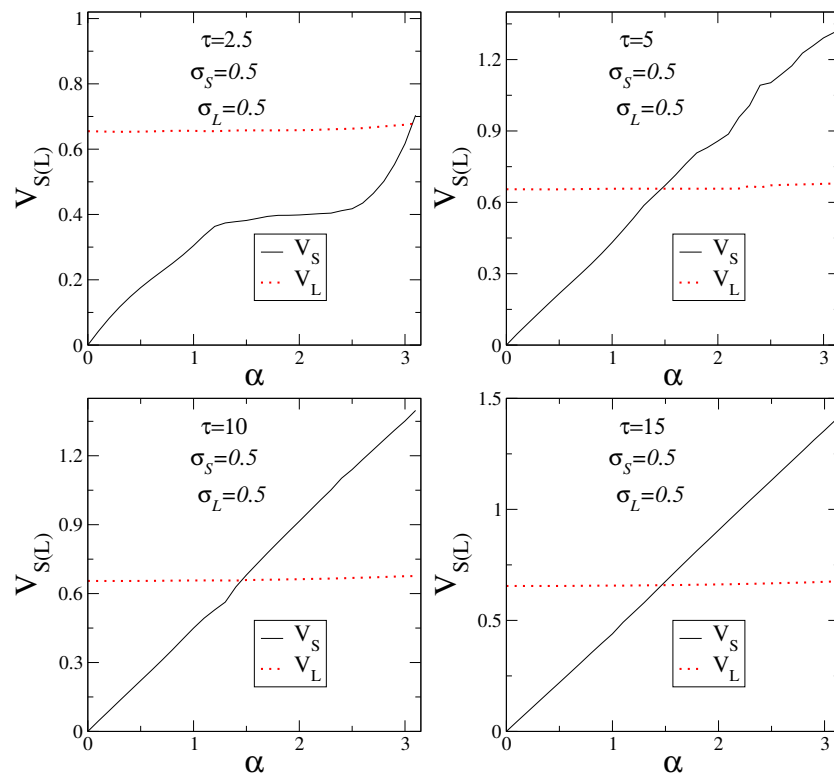


Figura 28. Velocidades do mágnon [V_S (linha sólida preta)] e da deformação da rede [V_L (linha pontilhada vermelha)] versus α . Considerando que $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 0,5$ e $\tau = 2,5$ até 15.

fenômeno, é preciso enfatizar que quando τ aumenta, os termos fora da diagonal na equação de Schrödinger tornam-se mais eficazes. Isto resulta em um acoplamento mais forte com a deformação da rede, mesmo para valores menores de α .

Também foi calculado distância média entre o mágnon e a deformação da rede, dada por $D = |n_L(t \rightarrow \infty) - n_S(t \rightarrow \infty)|$. Enfatizando que D representa também uma medida da possível existência do estado do par mágnon-sóliton. Em geral, os estados ligados exibem um valor menor de distâncias internas intrínsecas. Na Fig. 29 foi feito o plote de D/D_{max} versus α , onde D_{max} representa o máximo da distância entre o mágnon e a posição da rede. Comparando esses resultados com os da Fig. 28, é possível observar que para o mesmo valor de α em que $V_L \approx V_S$, nota-se que $D/D_{max} \approx 0$, ou seja, o mágnon e a posição da rede estão próximos, sugerindo assim a existência de pares mágnon-rede. Assim, o valor crítico de α em que $D/D_{max} \approx 0$ está em boa concordância com o valor crítico encontrado usando as curvas de velocidade versus α (ver Fig. 28). Portanto, todas as medidas de D/D_{max} , V_S e V_L são grandezas topológicas que caracterizam a propagação do mágnon e a deformação da rede. Os cálculos demonstram numericamente que para alguns valores específicos de $\alpha = \alpha_c$, a distância D é pequena, e o mágnon e a deformação da rede viajam na mesma velocidade. Este resultado indica fortemente a formação de um par mágnon-sóliton para estas situações especiais.

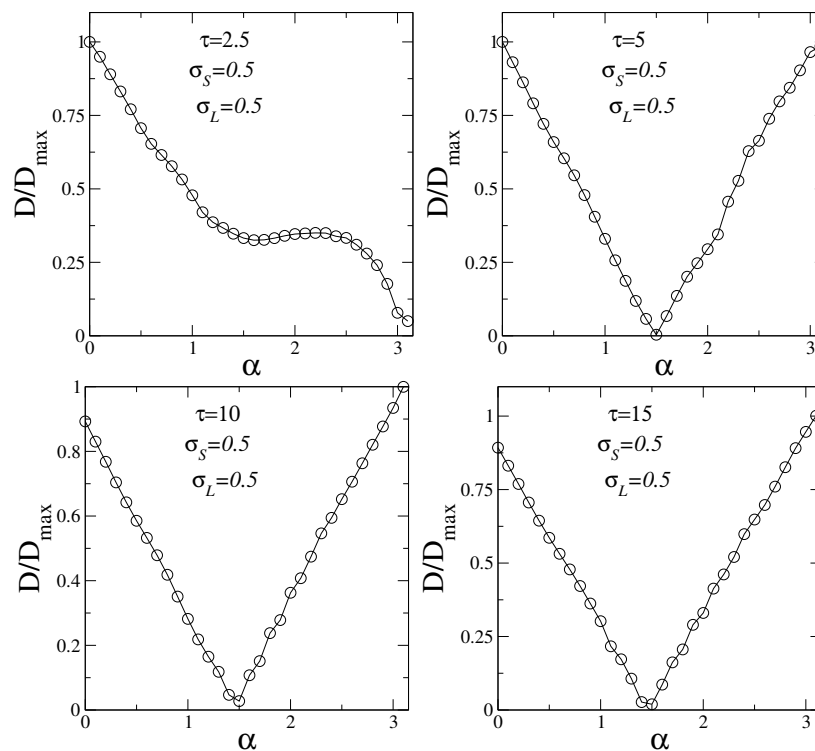


Figura 29. Distância normalizada entre o mágnon e a deformação da rede (D/D_{max}) versus α . Cálculos feitos para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 0,5$ e $\tau = 2,5$ até 15.

Na Fig. 30, foi feito um gráfico do valor crítico de α versus τ . Lembrando que para $\alpha = \alpha_c$ o sistema apresenta uma formação do par mágnon-rede, ou seja, a excitação magnética se move junto com a vibração da rede e na mesma velocidade. Outro ponto importante ressaltar é que a diminuição de α_c com τ é uma consequência direta do papel desempenhado por τ nos termos fora da diagonal na Eq.(4.25). À medida que τ aumenta,

o termo fora da diagonal também aumenta, assim, aumentar a interação *spin-spin* efetiva facilita o acoplamento entre o *spin* e as deformações da rede.

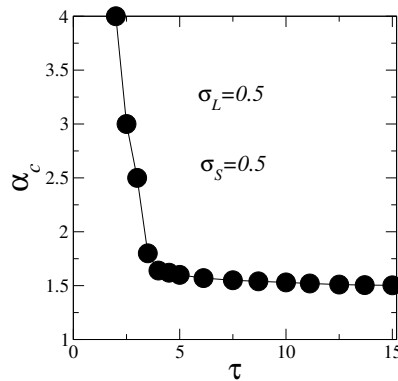


Figura 30. O valor crítico de α_c versus τ para $\sigma_S = \sigma_L = 0.5$.

Nas Figs. 31 e 32 foi considerado novamente $v_0 = 1$ e valores alternados de σ_S e σ_L para 0.5 e 1, respectivamente. Os valores de τ foram preservados. É possível observar

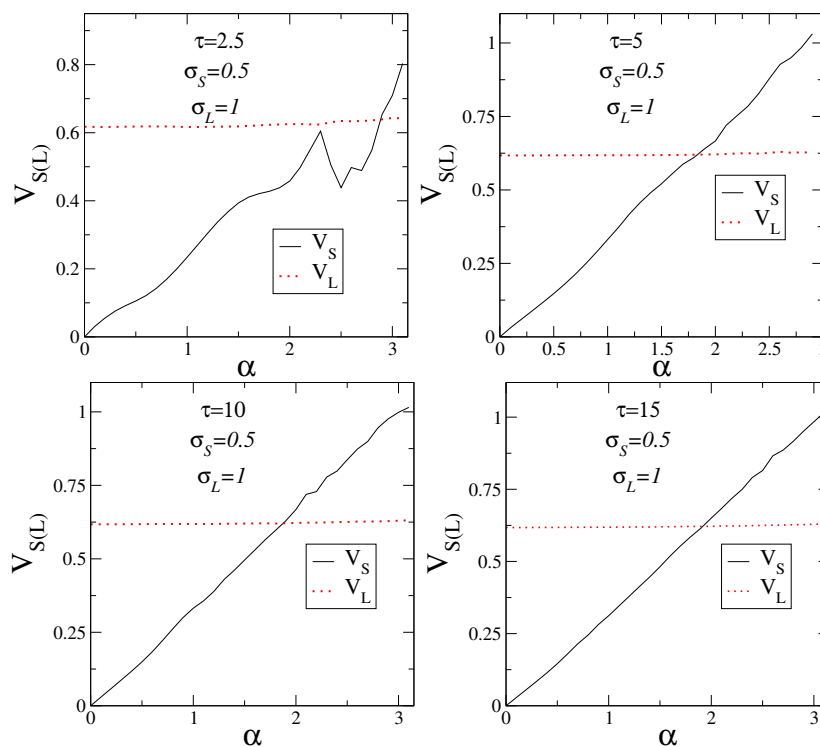


Figura 31. Velocidades do mágnon [V_S (linha sólida preta)] e da deformação da rede [V_L (linha pontilhada vermelha)] e versus α calculados usando $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0, 5$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2, 5$ até 15.

que os resultados são qualitativamente os mesmos obtidos nas Figs. 28 e 29, ou seja, à medida que o valor de τ aumenta, a formação do par mágnon-rede é obtida para um valor específico de $\alpha = \alpha_c$. Foi obtido também que à medida que τ aumenta, α_c diminui (ver Fig. 33). Nas Figs. 34 e 35 é mostrado que os resultados considerando $\sigma_S = 1$ e $\sigma_L = 1$, e

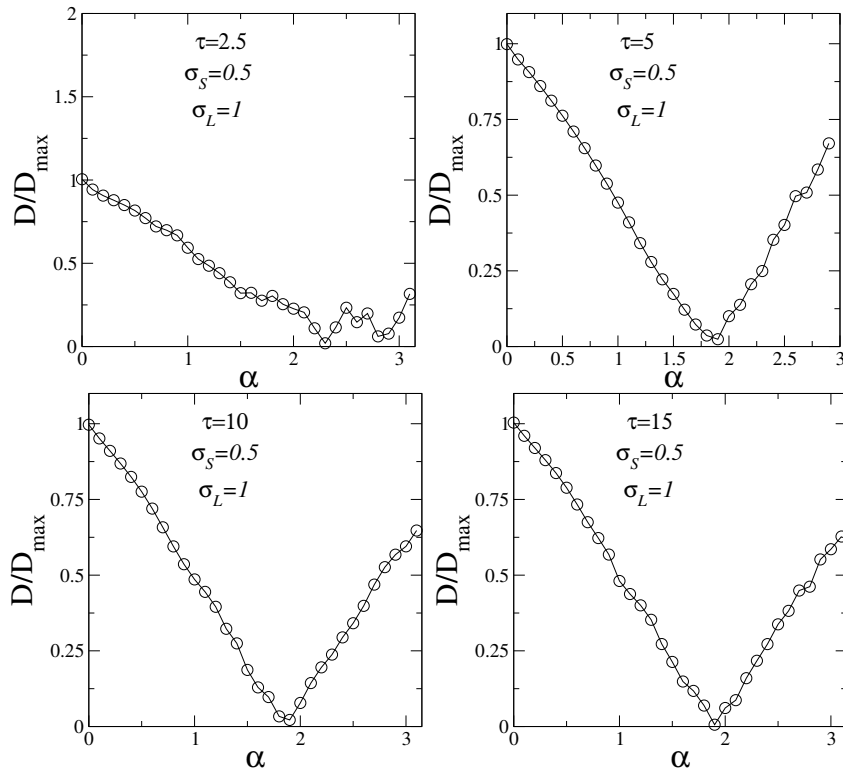


Figura 32. Distância normalizada entre o mágnon e a deformação da rede (D/D_{max}) versus α calculada para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0,5$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2, 5$ até 15.

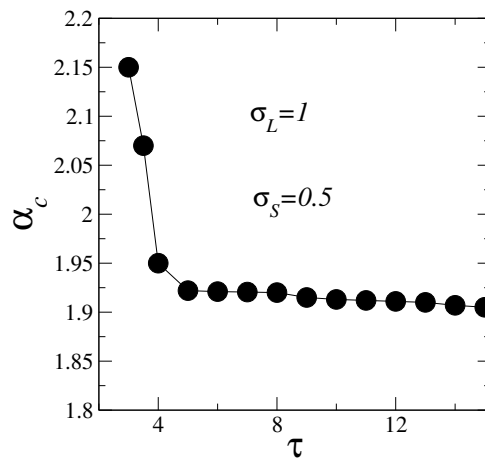


Figura 33. O valor crítico de α_c versus τ para $\sigma_S = 0.5$ e $\sigma_L = 1$.

mantendo a mesma faixa de valores de τ e v_0 . Os resultados obtidos são semelhantes aos das figuras anteriores. Parece que o par mágnon-rede só existe quando α é igual ao valor crítico α_c .

Este valor crítico diminui à medida que τ aumenta, conforme mostrado na Fig. 36. Fazendo uma síntese dos resultados obtidos até aqui, um pulso de velocidade gaussiana vibracional inicial foi introduzido na rede, e uma quantidade finita da energia inicial se propaga ao longo da rede através do modo solitônico não linear. Este comportamento foi observado

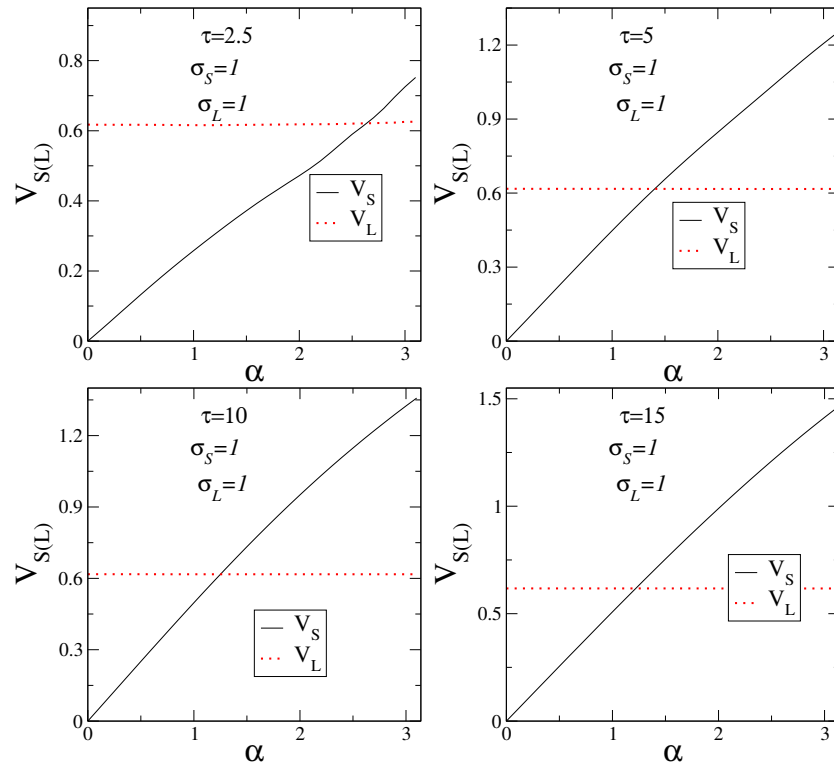


Figura 34. Velocidades do mágnon [V_S (linha sólida preta)] e da deformação da rede [V_L (linha pontilhada vermelha)] e versus α calculados usando $v_0 = 1$, $\sigma_S = 1$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2.5$ até 15.

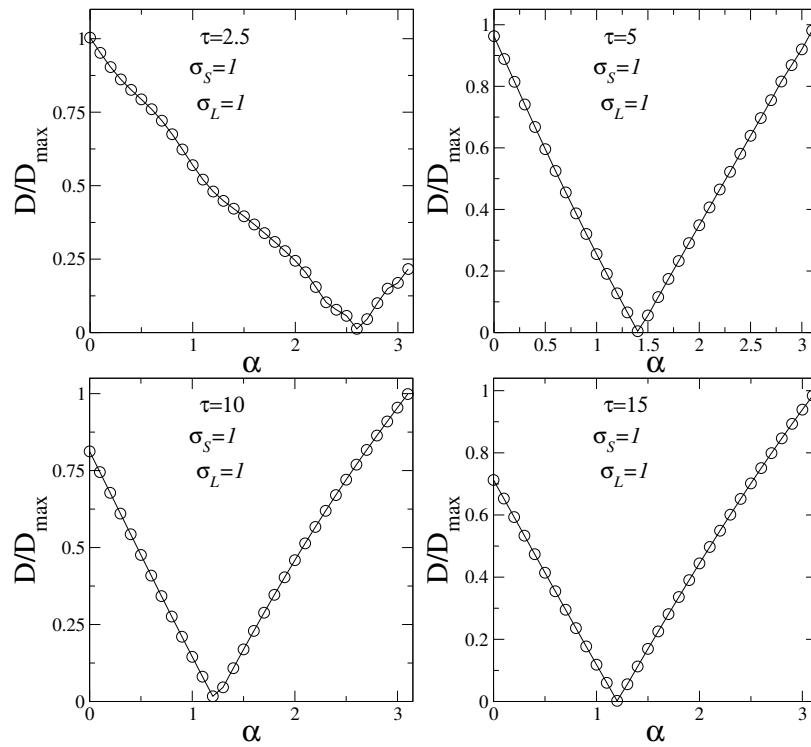


Figura 35. Distância normalizada entre o mágnon e a deformação da rede (D/D_{max}) versus α calculada para $v_0 = 1$, $\sigma_S = 1$, $\sigma_L = 1$ e $\tau = 2.5$ up to 15.

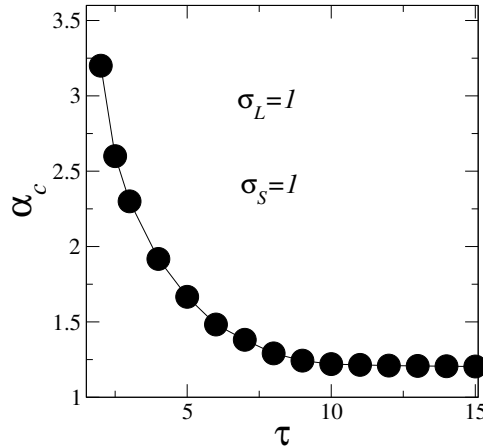


Figura 36. O valor crítico de α_c versus τ para $\sigma_S = \sigma_L = 1$.

rastreando a posição da rede ao longo do tempo, com os cálculos indicando que uma fração finita da energia inicial permaneceu presa em uma região finita da rede. Este pulso localizado poderia viajar ao longo da rede com uma velocidade constante V_L . Além disso, a equação quântica foi inicializada usando um pacote de onda de mágnon gaussiano, e os cálculos mostraram que o pacote de onda dominante exibiu um perfil solitônico com uma posição dada por $n_S(t) \approx V_S t$. Calculando V_S e V_L , foi demonstrado numericamente que dependendo do valor do acoplamento mágnon-rede, é possível obter uma boa indicação da formação do par mágnon-sóliton. Para certos valores de $\alpha = \alpha_c$, os cálculos indicaram que $n_S \approx n_L$ e $V_S \approx V_L$. No entanto, foi descoberto que condições iniciais amplas também podem levar à propagação do par mágnon-sóliton. O valor crítico para a ocorrência desse par depende da largura das condições iniciais e do valor de τ . O parâmetro τ mede a diferença de escala de tempo entre o mágnon e a deformação da rede e atua como a intensidade da interação *spin-spin* efetiva dentro das equações quânticas. Esta interação *spin-spin* também é a chave para a interação mágnon-rede. À medida que τ aumenta, os termos *spin-rede* tornam-se mais fortes, facilitando promover a formação de pares mágnon-sóliton.

Por fim, é preciso examinar como os resultados variam com o valor de v_0 . Especificamente, é necessário ver como a formação dos pares mágnon-sóliton é afetada pela força do impulso inicial. Para isso, foi realizado diversos experimentos numéricos com diferentes valores de v_0 , o que permite observar as assinaturas dos pares mágnon-sóliton. Analisando os resultados, foi descoberto que no intervalo de valores de v_0 entre 1 e 10, existe um par mágnon-sóliton quando α é igual a um certo valor, denotado como α_c . Contudo, este valor crítico depende do valor de v_0 . Por exemplo, os resultados obtidos para $\sigma_S = \sigma_L = 1$ e $\tau = 10$ (consulte a Fig. 37 (a)) revelaram que quando v_0 é baixo (menos de 3), o valor crítico permanece estável em torno de $\alpha_c = 1.205$, enquanto para valores de v_0 maiores que 3, o valor crítico diminuiu aproximadamente pela metade. Esta diminuição de α_c com o aumento de v_0 pode parecer contra-intuitiva, mas acredita-se a causa se deva

principalmente à intensidade do modo solitônico. À medida que o impulso inicial cresce, o sólton ganha mais intensidade, resultando num aumento da interação *spin*-rede que favorece o pareamento mágnon-sólton. Os cálculos mostram que independentemente dos valores de σ_L e σ_S , os resultados permanecem qualitativamente os mesmos. A velocidade do par mágnon-sólton (V_{SL}) também depende da velocidade inicial v_0 . Na Fig. 37 (b), foi observado que para v_0 pequeno, $V_{SL} \propto v_0$ e para $v_0 > 3$, $V_{SL} \propto v_0^{0.55(5)}$. É essencial observar que os resultados mostrados na Fig. 37 não dependem dos valores de σ_L , σ_S e τ . Geralmente, à medida que a velocidade aumenta, o modo solitônico torna-se mais rápido, resultando em um par mágnon-sólton mais rápido.

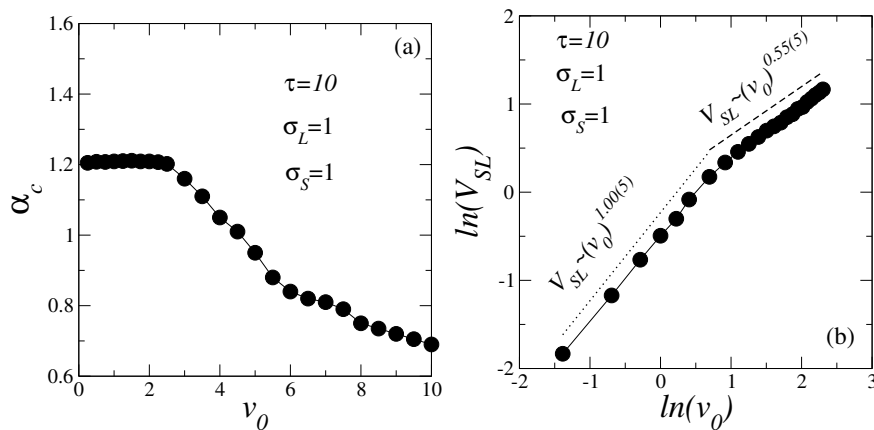


Figura 37. a) O valor crítico α_c versus v_0 ; b) A velocidade do par mágnon-sólton V_{SL} versus v_0 . Os cálculos foram feitos para $\sigma_L = \sigma_S = 1$ e $\tau = 10$.

Neste capítulo, foi investigado o comportamento de um estado de mágnon em uma cadeia de Morse não linear, considerando o acoplamento mágnon-rede através do termo *spin-spin* de Heisenberg que depende diretamente das posições do *spin*. As condições iniciais foram um pacote de onda gaussiana para o estado de mágnon e um pacote de impulsos gaussiano para a rede. A intensidade da velocidade e a largura desses pulsos gaussianos iniciais são parâmetros ajustáveis no modelo. Também foi variado as escalas de tempo entre a dinâmica do mágnon e da rede. Foi fornecido uma análise numérica detalhada de como os pares mágnon-sólton se propagam e sua dependência desses parâmetros. Os resultados revelam que as propagações dos pares mágnon-sólton são atingíveis para valores específicos da interação mágnon-rede (chamado de α_c neste modelo) e que este valor crítico é altamente dependente da largura dos pulsos gaussianos iniciais. Os cálculos numéricos indicam que aumentando a velocidade do pulso gaussiano inicial diminui o valor crítico da interação *spin*-rede (α_c). Além disso, à medida que a diferença de tempo entre a dinâmica do mágnon e da rede aumenta, a intensidade do acoplamento mágnon-rede necessária para promover a formação de pares diminui. No geral, este estudo ressalta a importância das condições e as especificidades da dinâmica mágnon/rede na existência de pares mágnon-sólton em cadeias não lineares. Foi demonstrado que uma diferença

de tempo de $\tau \geq 10$ produz uma existência mais confiável do acoplamento mágnon-rede, consistente com pesquisas anteriores.

5 Transferência de Mágnon em Cadeias com Desordem Correlacionada

5.1 Introdução

A dinâmica das ondas de *spin* tem atraído considerável atenção na última década, devido às suas aplicações promissoras em tecnologia da informação [121]. Além de originar uma física rica, essas ondas oferecem vantagens sobre o transporte eletrônico convencional em termos de dissipação de energia [122]. Trabalhos experimentais recentes têm explorado o uso de mágnons para controlar paredes de domínio magnético [123]. Essas paredes representam regiões em um material magnético onde a orientação dos domínios magnéticos adjacentes se separa. Os domínios magnéticos, por sua vez, são definidos como regiões em um material onde os momentos magnéticos dos átomos ou magnéticos elementares estão alinhados uniformemente em uma direção específica, resultando em uma magnetização local. A formação de paredes de domínio magnético ocorre quando há uma transição na direção da magnetização em um material. Os mágnons também são empregados na formação de condensados de Bose-Einstein¹ [124] e para facilitar um transporte eficiente [125]. Devido às suas propriedades, as ondas de *spin* também encontram aplicações no processamento de informação quântica [126]. A transmissão de curta a moderada distância tem se mostrado viável em cadeias de *spin* com parâmetros estáticos, que operam na evolução temporal natural do sistema. Portanto, o perfil topológico do sistema desempenha um papel crucial na entrega da saída desejada, como ilustrado no trabalho conduzido por Almeida [127], onde foi considerado um canal assimétrico unidimensional conectando dois *spins*, um posicionado em cada extremidade.

Na pesquisa conduzida por Gualdi *et al.* [128], foram investigadas as condições mais gerais sob as quais uma cadeia de *spin* de interação ferromagnética finita de longo alcance atinge fidelidade unitária e o menor tempo de transferência na transmissão de um *qubit* de entrada desconhecida. Outras configurações incluem cadeias de *spin* 1/2 escalonadas [129, 130] que exibem propriedades topológicas ricas. A transferência de estado quântico de muitos *qubits* também foi explorada [131].

Neste trabalho, explorou-se o modelo quântico unidimensional de Heisenberg para *spin* 1/2 com acoplamentos de troca desordenados e campos magnéticos não uniformes. Especificamente, a interação *spin-spin* foi submetida a uma distribuição de desordem correlacionada com o espectro da lei de potência $s(k) \propto k^{-\beta}$, onde k é o vetor de onda

¹ O condensado de Bose-Einstein é um estado da matéria que ocorre em temperaturas extremamente baixas, muito próximas do zero absoluto, onde os efeitos quânticos dominam o comportamento das partículas.

de modulação e β é um expoente ajustável. Os resultados demonstraram que a desordem correlacionada pode aprimorar a qualidade dos protocolos de transferência de estado quântico em comparação com o caso não correlacionado [132]. Portanto, a interação entre desordem e correlações foi investigada em um protocolo de transferência de mágnon. No canal, o campo magnético assumiu valores aleatórios independentes distribuídos uniformemente dentro de uma determinada largura de desordem. Nas extremidades da cadeia, os campos magnéticos foram considerados como parâmetros ajustáveis, responsáveis por explorar os modos mágnon no espectro. O processo de transferência de estado quântico envolve a preparação de um mágnon em um lado da cadeia e permitir sua reconstrução (tanto quanto possível) no outro lado ao longo da evolução temporal. A qualidade do protocolo foi avaliada pela fidelidade de transferência [29] e pela concorrência [75]. Os resultados indicaram que a presença de correlações no acoplamento *spin-spin* desordenado promove altas fidelidades de transferência sob campos magnéticos fracos

5.2 Modelo e Formalismo

O modelo considerado neste trabalho será o modelo quântico de Heisenberg unidimensional com N partículas de *spin* $1/2$ sob o efeito de um campo magnético não uniforme \mathbf{H}_n . O Hamiltoniano deste sistema é dado por

$$H = - \sum_{n=1}^N \{ J_n \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \mathbf{H}_n \cdot \mathbf{S}_n \}, \quad (5.1)$$

onde J_n são os acoplamentos de troca que conectam os primeiros vizinhos. O protocolo de transferência de mágnon ocorre entre o primeiro e o último sítio da cadeia ($n = 1$ e $n = N$) atuando como fonte e receptor, respectivamente, e o campo magnético externo \mathbf{H}_n vai atuar nesses mesmos *spins*, para os demais ele é nulo. O acoplamento de troca entre a fonte e o sítio $N = 2$ e entre o receptor e o sítio $N - 1$ é definido por $J_1 = J_{N-1} = j_0$, os demais acoplamentos no canal apresentam um tipo de desordem correlacionado de longo alcance (ver Eq.(1.32)), definido como

$$J_n = \sum_{k=1}^{N/2} k^{-\beta/2} \cos \left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k \right), \quad (5.2)$$

onde ϕ_k é uma fase aleatória uniformemente distribuída no intervalo de $[0, 2\pi]$. O expoente β é um parâmetro ajustável para controlar o grau de correlações. Quando $\beta = 0$, os acoplamentos J_n são não correlacionados obedecendo uma distribuição gaussiana. Para $\beta > 0$, correlações de longo alcance se estabelecem e modificam o perfil de localização dos modos. Na verdade, o modelo de Anderson apresenta apenas desordem diagonal, mas quando $\beta > 2$, os incrementos da série tornam-se persistentes e culminam em uma transição de estados localizados para não localizados [42].

Para fazer o estudo das ondas de *spin* é necessário obter a equação de Schrödinger para esse tipo de sistema. Considerando inicialmente que não se tem a presença de campo magnético ($\mathbf{H}_n = 0$), assim, nessas condições chega-se ao Hamiltoniano referente a Eq.(4.1), conseqüentemente, a equação de Schrödinger independe do tempo (ver Eq.(4.24)) referente a esse Hamiltoniano é dada por

$$(J_n + J_{n-1})f_n - J_n f_{n+1} - J_{n-1} f_{n-1} = 2\epsilon f_n. \quad (5.3)$$

Agora, considerando $\mathbf{H}_n \neq 0$ apontando na direção z , deve-se ter um termo $H_n = G_H \mu_H h_n$, onde h_n é o campo magnético, G_H é o termo giromagnético e μ_H é o magneton de Bohr. Assim, incluindo o termo $-\mathbf{H}_n \cdot \mathbf{S}_n$ no Hamiltoniano, o resultado na relação de recorrência é a adição do termo $2H_n f_n$, logo, a equação de Schrödinger dependente do tempo considerando $\epsilon = i\hbar d/dt$ é escrita como

$$(J_n + J_{n-1} + 2H_n)f_n - J_n f_{n+1} - J_{n-1} f_{n-1} = 2i\hbar \frac{d}{dt} f_n. \quad (5.4)$$

O campo magnético não uniforme no canal são números aleatórios distribuídos uniformemente com uma largura de desordem h , ou seja, $H_n \in [-h/2, h/2]$ para $n \neq 1$ e N . O campo que atua nos *spins* externos é fixado em $H_1 = H_N = E_{SR}$. Os estados de mágnon apresentam um único *spin* flipado em um determinado local n , ou seja, $|n\rangle = S_n^+ |g\rangle$, onde $|g\rangle$ denota o estado fundamental ferromagnético.

Para resolver esse conjunto de equações (5.4), será adotado o método do operador de evolução temporal [133]. A grande vantagem desse método é a precisão numérica, mas com alto custo computacional devido ao cálculo que exige a diagonalização total do Hamiltoniano. Assim, considerando um sistema quântico descrito por um Hamiltoniano H , a evolução temporal de um estado quântico qualquer é dado da seguinte maneira

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (5.5)$$

onde $|\psi(0)\rangle$ é o estado no tempo $t = 0$ e $e^{-iHt/\hbar}$ é o operador de evolução temporal. Agora, fazendo a expansão de $|\phi(t)\rangle$ e $|\psi(0)\rangle$ na base dos orbitais $|l\rangle$ da seguinte forma

$$|\phi(t)\rangle = \sum_l f_l(t) |l\rangle \quad (5.6)$$

e

$$|\psi(0)\rangle = \sum_l f_l(0) |l\rangle. \quad (5.7)$$

Substituindo (5.6) e (5.7) em (5.5), é obtido que

$$\sum_l f_l(t) |l\rangle = e^{iHt/\hbar} \sum_l f_l(0) |l\rangle. \quad (5.8)$$

Como o conjunto $\{|l\rangle\}$ é uma base do espaço de Hilbert, pode-se usar esse conjunto para escrever H na forma matricial ou expandir os seus autovetores. Logo, seja $|\psi_j\rangle$ um

autovetor de H , ou seja, $H|\psi_j\rangle = E|\psi_j\rangle$, é possível expandir $|\psi_j\rangle$ na base de orbitais da seguinte forma

$$|\psi_j\rangle = \sum_l c_l^j |l\rangle. \quad (5.9)$$

Assim, fazendo uso de $\{|\psi_j\rangle\}$ para expandir o estado inicial $|\psi(0)\rangle$, tem-se

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_j \langle\psi_j| \left[\sum_l f_l(0) |l\rangle \right] |\psi_j\rangle = \sum_j \left[\sum_m c_m^{j*} \langle m| \right] \left[\sum_l f_l(0) |l\rangle \right] |\psi_j\rangle \\ &= \sum_{l,m,j} c_m^{j*} f_l(0) [\langle m|l\rangle] |\psi_j\rangle. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Tomando H como Hermitiano, é possível escrever a Eq.(5.10) da seguinte forma

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_{l,m,j} c_m^j f_l(0) \delta_{m,l} |\psi_j\rangle = \sum_{l,j} c_l^j f_l(0) |\psi_j\rangle \\ &= \sum_j \left[\sum_l c_l^j f_l(0) \right] |\psi_j\rangle. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Fazendo uso da Eq.(5.11), reescreve-se a Eq.(5.5) como

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_j \left[\sum_l c_l^j f_l(0) \right] |\psi_j\rangle \\ &= \sum_j \left[\sum_l c_l^j f_l(0) \right] e^{-iHt/\hbar} |\psi_j\rangle = \sum_j \left[\sum_l c_l^j f_l(0) \right] e^{-iE_j t/\hbar} |\psi_j\rangle. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Agora, substituindo as Eqs.(5.6) e (5.9) em (5.12), tem-se

$$\sum_l f_l(t) |l\rangle = \sum_j \left[\sum_l c_l^j f_l(0) \right] e^{-iE_j t/\hbar} \sum_m c_m^j |m\rangle. \quad (5.13)$$

Tomando $A_j = \sum_l f_l(0) c_l^j$, é obtido que

$$\sum_l f_l(t) |l\rangle = \sum_{j,m} A_j c_m^j e^{-iE_j t/\hbar} |m\rangle. \quad (5.14)$$

Fazendo uma mudança de variável do tipo $m \rightarrow l$ do lado direito e depois de $l \rightarrow n$ na Eq.(5.14) é obtido que

$$\begin{aligned} \sum_n f_n(t) |n\rangle &= \sum_j \sum_n A_j c_n^j e^{-iE_j t/\hbar} |n\rangle \\ f_n(t) &= \sum_j A_j c_n^j e^{-iE_j t/\hbar}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Portanto, se for tomando o modelo de Anderson unidimensional, este formalismo é interessante considerando redes pequenas com $N < 10^4$, por exemplo. Para sistemas maiores, técnicas como o método de Taylor são mais recomendáveis.

O estado de um *qubit* para $t = 0$ dado por $|\phi(0)\rangle = c_0 |g\rangle + c_1 |1\rangle$, é preparado no primeiro sítio da rede de *spins*. A propagação deste estado ocorre no subespaço de um

mágnon. Para uma rede de N sítios, a amplitude de transição para a outra extremidade da cadeia é dado por $f_N(t)$, assim, a fidelidade de saída de todas as amplitudes possíveis $\{c_0, c_1\}$ que cobre toda a esfera de Bloch é dada por uma função monotônica de tal amplitude, a chamada fidelidade média (ver Eq.(1.98)). Também é calculada a concorrência (ver Eq.(1.108)) entre as partes comunicantes. Outra quantidade física de interesse desse trabalho é a função

$$d(E_j) = N(|a_j| - |b_j|), \quad (5.16)$$

onde que, para um determinado autovalor E_j , $|a_j|$ e $|b_j|$ representam as amplitudes máxima e mínima, respectivamente. Essa função é usada para medir o grau de localização dos estados no canal ($N = 2$ à $N - 1$), ou seja, para cada autoenergia E_j será encontrado os valores máximos e mínimos do pacote de onda. Em um sistema que apresente características de isolantes (estados localizados) essa função aumenta com N . Para estados estendidos $|a_j| \approx |b_j|$ a função $d(E_j)$ torna-se menor e aproximadamente independente de N . Portanto, usando esta medida topológica é possível detectar modos estendidos em todo o espectro. Por fim, tem-se a probabilidade total de ocupação no canal, dada por

$$F_c = \sum_{n=2}^{N-1} |f_n|^2. \quad (5.17)$$

Quando essa quantidade atinge o seu valor máximo ($F_c = 1$), isso indica que não aconteceu a transferência do estado através do canal.

5.3 Resultados e Discussões

Na Fig. 38 é mostrado a função $d = d(E)$ para $\beta = 0, 0.5, 1.5$ e 3 , após a diagonalização exata do canal desordenado. Esses resultados são para $h = 0$, ou seja, ausência de campo magnético externo. Quando $\beta > 1$, todas as curvas para $E < 1$ colapsam para um platô, isso indica que a quantidade não depende de N , o que é uma assinatura clara dos modos de mágnon estendidos. Para $E > 1$, é observado que $d(E)$ aumenta com N , esse comportamento indica a presença de modos localizados. Esta divisão acentuada é o resultado de fortes correlações de longo alcance que se estabelecem quando $\beta > 1$. Se $\beta < 1$, o sistema exhibe apenas estados estendidos nas proximidades do modo uniforme ($E = 0$).

Os próximos resultados são referentes a investigação da transferência do mágnon de uma extremidade para a outra da rede. Para isso, é escolhido que o campo magnético nos sítios 1 e N deve estar em ressonância com uma determinada energia do espectro do canal que suporta os estados estendidos. Assim, foi tomado que $E_{SR} = 0.5$ para todas as simulações apresentadas a seguir. Para o cálculo da fidelidade média, foi definido que o estado inicial é dado por $f_n(t = 0) = \delta_{n,1}$. Na Fig. 39 é mostrada a fidelidade

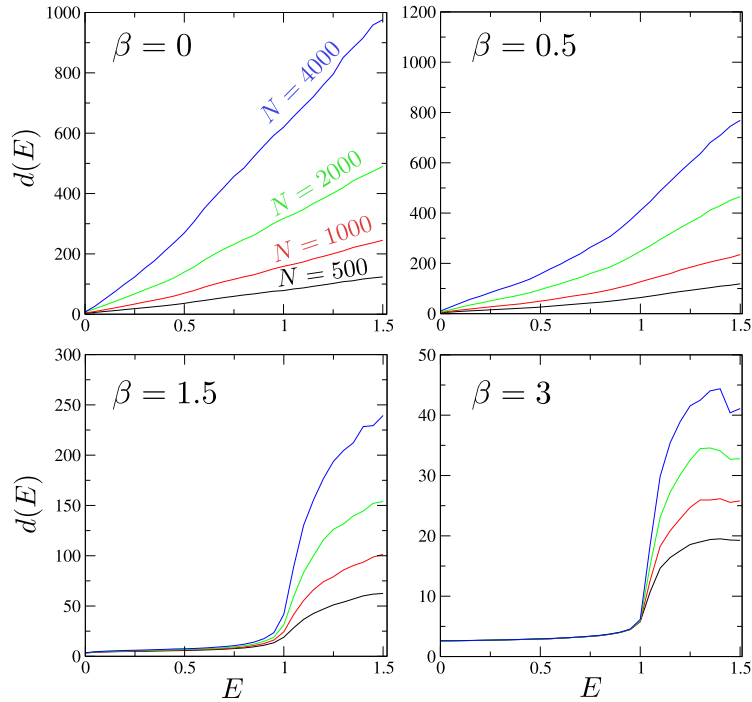


Figura 38. Função $d(E)$ versus energia E na ausência do campo magnético ($h = 0$). Cada painel representa um valor diferente do expoente de correlação β . Vários tamanhos de sistema são considerados e cada curva é calculada fazendo em média 500 realizações distintas de desordem.

máxima (F_{max}) para o intervalo de tempo de $[0, 10^6]$ em uma rede com 60 sítios, com acoplamento fraco $j_0 = 0.01$ e campo magnético nulo ($h = 0$). Enfatizando que se tem como objetivo destacar apenas o papel da correlação de longo alcance. Quando se toma $\beta < 1$, a distribuição de probabilidade é ampla, sendo extremamente raras as transferências de alta fidelidade, isso é uma consequência da ausência de modos estendidos de mágnon em torno de $E = 0.5$. Mesmo que a evolução temporal não forneça $|f_N| \approx 1$ nesse caso, é apontado para o fato de que a dinâmica ainda está ocorrendo quase exclusivamente no subespaço medido por $|1\rangle$ e $|N\rangle$. Suas energias locais efetivas, no entanto, estão desafinadas devido ao perfil espacial dos estados localizados e à falta de simetria partícula-buraco no espectro do canal. Mesmo com a ausência do campo magnético desordenado, os termos diagonais do Hamiltoniano envolve uma soma de acoplamentos de troca J_n e J_{n-1} , sendo números aleatórios correlacionados. Para $\beta > 1$ na Fig. 39, o desempenho melhora dramaticamente e ainda mais quando $\beta > 2$. Agora, apesar da presença de desordem, a grande maioria das amostras (cerca de 35% de 3000 realizações independentes de desordem) fornece fidelidades acima de 0.95.

Para ver se o canal está pouco preenchido durante a realização do protocolo desde que $j_0 \ll 1$, independente da fidelidade do resultado, foi calculado F_c . Isto representa a probabilidade de ocupação total no canal. Os resultados mostrados na Fig. 40, onde traçamos F_c versus j_0 para valores distintos de $\beta = 0, 1.5, 3$. Pode ser observado a formação

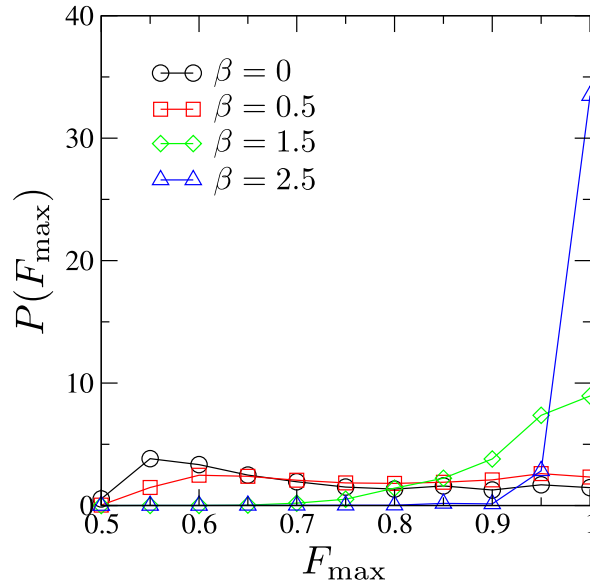


Figura 39. Distribuição de probabilidade da fidelidade máxima $P(F_{max})$ versus F_{max} . Os cálculos são feitos considerando $N = 60$, $j_0 = 0.01$, $h = 0$, $E_{SR} = 0.5$ e vários valores de β . Os dados são obtidos para 3000 realizações de desordem independentes.

de um subespaço de dois níveis não é afetada pelo grau de correlação β . Mas à medida que j_0 aumenta, o mágnon inicial localizado em delta se dispersará no canal.

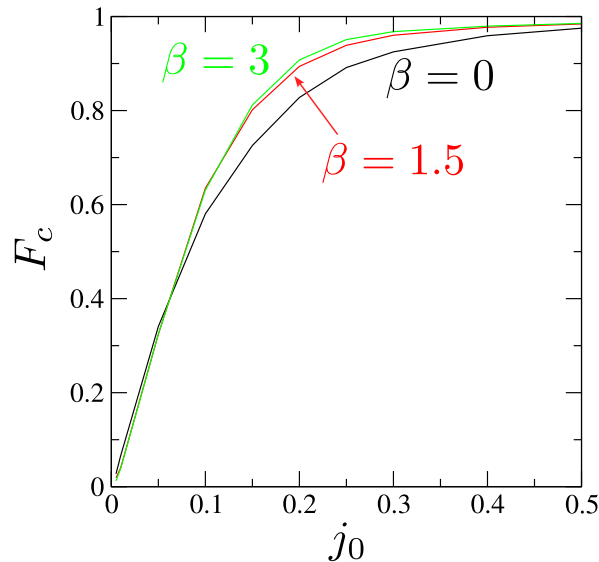


Figura 40. Probabilidade total de ocupação do canal F_c versus j_0 para $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $h = 0$, e $\beta = 0, 1.5, 3$. As curvas são calculadas em média em 3000 realizações de desordem independentes

A descrição efetiva de dois níveis não é mais válida e a transferência de estado quântico torna-se inviável. Isto é mostrado na Fig. 41 para os mesmos parâmetros considerados anteriormente, agora incluindo o campo magnético desordenado com larguras $h = 0.2$ e $h = 0.4$. A tendência de decaimento parece semelhante em todos os casos, embora com

parâmetros de escala diferentes. Observamos que o campo magnético desordenado afeta mais severamente o desempenho da transferência, mesmo quando β é grande.

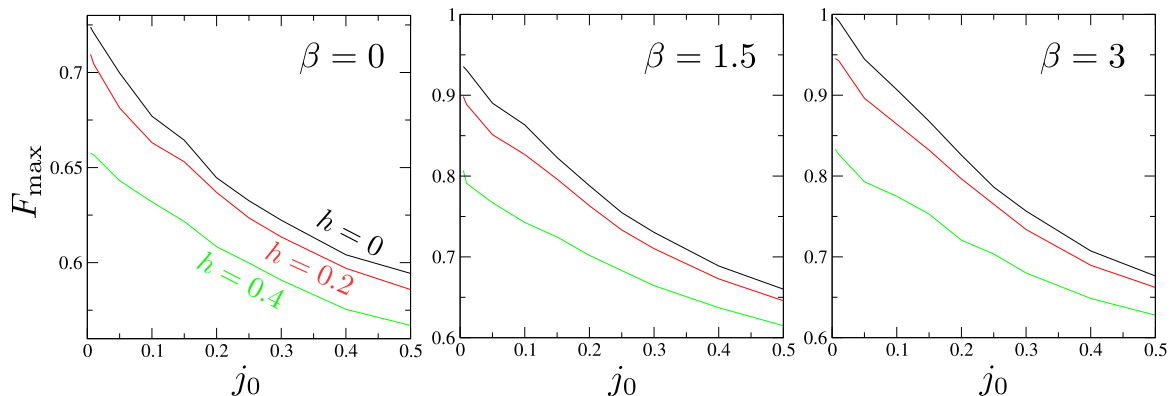


Figura 41. F_{max} versus acoplamentos fracos externos j_0 para $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $h = 0, 0.2, 0.4$ e $\beta = 0, 1.5, 3$. As curvas são calculadas em média em 3.000 realizações de desordem.

Na Fig. 42 é possível notar uma dependência de F_{max} e C_{max} com β com mais detalhes. Ambas as quantidades estão correlacionadas, o que significa que o emaranhamento entre o primeiro e último *spin* eventualmente aumenta com a fidelidade. Outro detalhe interessante é que o ganho de desempenho induzido pelas correlações de longo alcance atinge um limite para $\beta > 2$. Tal nível saturado é definido pela desordem residual não correlacionada devido aos campos magnéticos. Isto é, à medida que as correlações de longo alcance funcionam para reduzir a variância local dos termos diagonais do Hamiltoniano, a série não correlacionada entregue por H_n eventualmente supera. A localização de Anderson torna-se então relevante no espectro do canal. Ainda assim, é possível obter fidelidades superiores ao limite correspondente a uma transmissão clássica de um estado quântico, $F = 2/3$, mesmo para larguras de desordem tão grandes quanto $h = 0.4$

Por fim, foi analisado como o desempenho se adapta ao tamanho do sistema. A Fig. 43 mostra tal dependência para $N = 60$ até 160, com $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0.2$ e $\beta = 1.5$ e 3. Tanto a fidelidade quanto a concorrência são prejudicadas à medida que N aumenta. Isto se deve ao fato de j_0 ser constante. O número de modos cresce com N e assim a densidade de estados em torno do nível de energia $E = 0.5$ para o qual os *spins* da fonte e do receptor são sintonizados. Ainda assim, mais uma vez as fidelidades obtidas para os tamanhos do sistema considerados na Fig. 43 sob a influência das duas fontes de desordem são superiores ao limite clássico $F = 2/3$. À medida que N aumenta, se o mesmo nível de fidelidade (ou maior) deseja-se que j_0 deve ser ajustado de acordo. Uma consequência da redução de j_0 é que o acoplamento perturbativo entre os *spins* mais externos responde proporcionalmente à j_0^2 . Em última análise, faz com que o tempo de transferência aumente proporcionalmente à j_0^{-2} . Portanto, há uma restrição física sobre o tamanho do sistema N . E deve ser definido conforme a velocidade/fidelidade desejada do

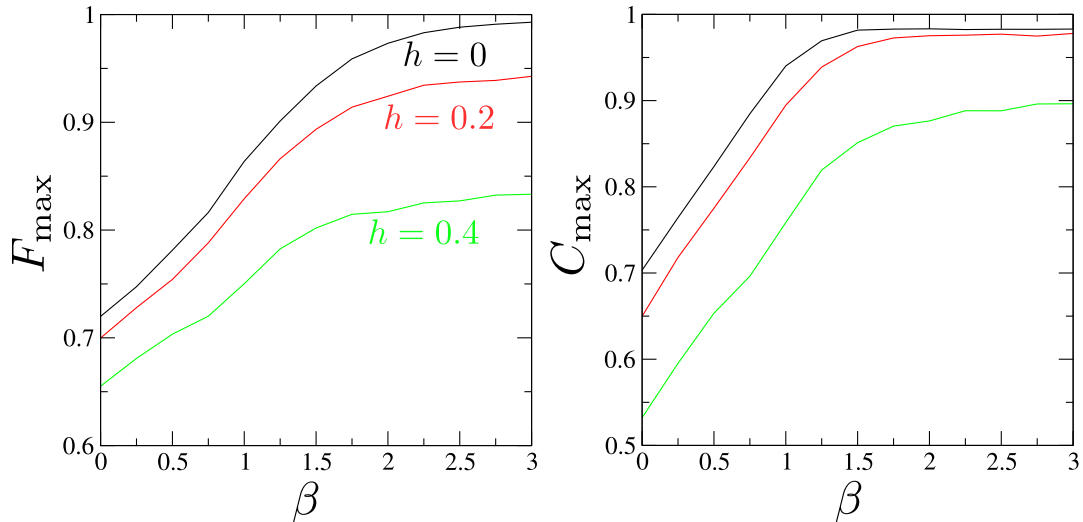


Figura 42. Fidelidade máxima F_{max} e concorrência máxima C_{max} versus β para $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0, 0.2, 0.4$. Ambas as quantidades são calculadas em média em 3000 realizações de desordem independentes.

protocolo de transferência de estado quântico.

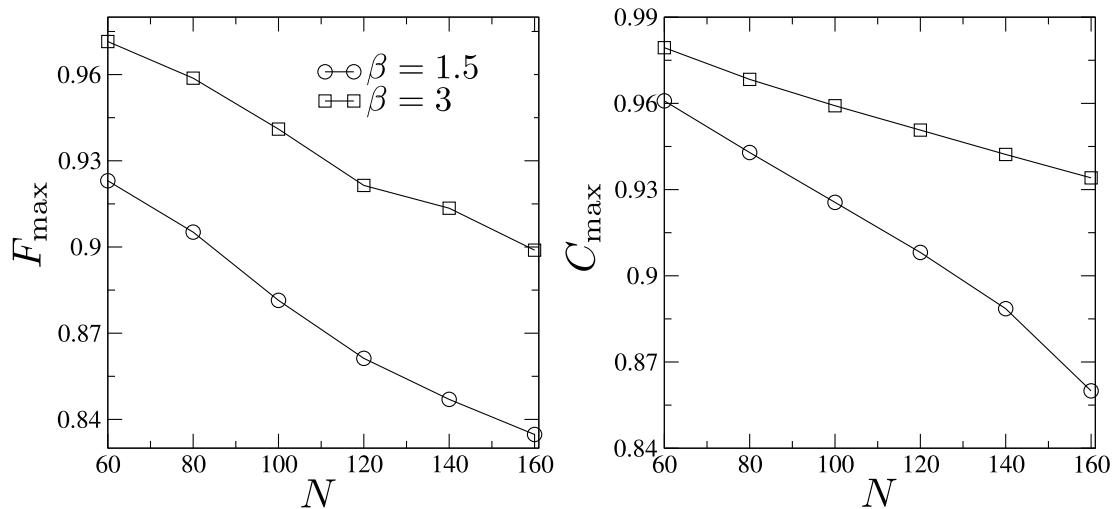


Figura 43. Fidelidade máxima F_{max} e concorrência máxima C_{max} versus tamanho do sistema N . Os parâmetros do sistema são $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0.2$, $\beta = 1.5$ e 3 . As curvas são calculadas em média com 3000 realizações de desordem distintas.

Neste capítulo, foi explorado o modelo unidimensional de Heisenberg de *spin* 1/2 como um canal de transferência de estado quântico sob a influência de campos magnéticos desordenados e acoplamentos de troca. Este último apresenta um distúrbio correlacionado de longo alcance controlado por um parâmetro β . Os campos magnéticos são aleatórios seguindo uma distribuição em forma de caixa de largura h . A competição entre estas duas fontes de desordem é crucial na definição da qualidade do protocolo. O *qubit* a ser transmitido é codificado em um estado mágnon criado em um estado fundamental

ferromagnético. Quando $h = 0$ e $\beta > 2$, a transferência de estado quase perfeita é alcançada. Isto é possível devido à presença de estados estendidos no canal. A localização de Anderson é induzida ao definir $h \neq 0$, o que deteriora a qualidade geral da transferência. No entanto, uma transmissão melhor que a clássica ainda é possível para h moderado.

6 Conclusão

Nesta tese, foram investigados o transporte eletrônico e de *spin* na presença de termos de interação, bem como a transferência de estados quânticos. O foco da pesquisa concentrou-se nas interações elétron-elétron, elétron-rede, *spin*-rede, e no estudo do modelo de Heisenberg com acoplamento de troca desordenado. No primeiro trabalho, que abordou a interação elétron-elétron, considerou-se o efeito da interação de Coulomb e a interação com um termo de campo elétrico externo. O modelo incorporou uma interação elétron-elétron efetivamente exponencial, considerando um comportamento semelhante ao observado em sólidos, devido aos efeitos de blindagem eletrostática. Os estudos numéricos indicaram que, para a geometria unidimensional, a interação elétron-elétron cria uma sub-banda de estados ligados, destacando-se inicialmente da banda principal de estados para $U = 6$ e $U = 12$. Os resultados detalharam o surgimento de uma nova sub-banda em função das distâncias típicas de interação e investigaram o alargamento dessa sub-banda e sua dependência com o perfil de interação entre elétrons. A dinâmica do sistema sob a ação de um campo elétrico externo revelou que a interação entre as partículas promove um movimento coerente, resultando em modos de oscilação com frequência dobrada.

No segundo trabalho, considerou-se a propagação eletrônica sob o efeito da interação elétron-rede. Utilizou-se o modelo FPU com termo não linear cúbico, e o acoplamento entre o elétron e a rede foi introduzido por meio de uma relação matemática entre o *hopping* eletrônico e a distância entre os átomos. As equações acopladas para o sistema elétron-rede foram resolvidas, resultando em uma descrição detalhada da dinâmica do elétron e da rede para uma ampla gama de intensidades de acoplamento elétron-rede. Os resultados demonstraram que a formação de um par elétron-rede depende da condição inicial e da intensidade da interação elétron-rede, destacando também a possibilidade de observar repulsão entre a deformação do elétron e da rede.

No terceiro trabalho, realizou-se uma pesquisa sobre o mágnon acoplado em uma rede de Morse, onde o acoplamento entre os *spins* era dependente das posições. A análise dos resultados possibilitou a caracterização da formação do par mágnon-sóliton para alguns valores da interação entre o mágnon e a rede (α_c). Parâmetros ajustáveis, como o aumento da velocidade do pulso gaussiano, foram investigados, indicando uma diminuição nos valores de α_c e a formação do par mágnon-sóliton. O aumento da diferença entre o tempo da dinâmica do mágnon e da rede (τ) reduziu a magnitude do acoplamento necessário para formar pares.

No quarto trabalho, estudou-se o modelo de Heisenberg unidimensional de *spin* 1/2 no contexto da transferência de estados quânticos na presença de um campo magnético

aleatório. O acoplamento J_n dependia de um parâmetro ajustável β , que controlava o grau de correlação. O sistema foi investigado em situações com campo magnético nulo, resultando na transferência do estado de mágnon, e em situações sob a influência de campo magnético, possibilitando a indução de localização de Anderson. Se faz importante salientar que os principais resultados destes trabalhos foram submetidos para revistas internacionais: parte dos resultados do problema dos dois elétrons foi publicado no *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* (ver Anexo A) em parceria com outro grupo do IF/UFAL; o trabalho que trata do sistema envolvendo a dinâmica elétron-rede foi publicado no *International Journal of Modern Physics C* (ver Anexo B); o modelo com interação mágnon-rede foi publicado nos Anais da Academia Brasileira de Ciências (AABC) (ver Anexo C); e o trabalho que trata sobre transferência de estados quânticos foi publicado no *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (ver Anexo D). Uma perspectiva para este trabalho é estudar o modelo incluindo interações elétron-elétron bem como os termos de interação com a rede. Pretende-se entender melhor o papel da interação não local entre os elétrons bem como o termo de interação com os fônons.

Referências

- [1] N. Ashcroft, N. Mermin, Solid State Physics, Cengage Learning, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 16, 17, 20 e 55.
- [2] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th Edition, Wiley, 2004. Citado 4 vezes nas páginas 16, 17, 21 e 33.
- [3] P. W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, Physical review **109** (1958). Citado 4 vezes nas páginas 16, 24, 28 e 33.
- [4] J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **276** (1963). Citado 3 vezes nas páginas 16, 30 e 49.
- [5] F. Bloch, Quantum mechanics of electrons in crystal lattices, Z. Phys **52** (1928). Citado 2 vezes nas páginas 16 e 32.
- [6] G. Corrielli, A. Crespi, G. Della Valle, S. Longhi, R. Osellame, Fractional bloch oscillations in photonic lattices, Nature communications **4** (2013). Citado na página 16.
- [7] W. Zhang, H. Yuan, H. Wang, F. Di, N. Sun, X. Zheng, H. Sun, X. Zhang, Observation of bloch oscillations dominated by effective anyonic particle statistics, Nature Communications **13** (2022). Citado na página 16.
- [8] P. M. Preiss, R. Ma, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, P. Zupancic, Y. Lahini, R. Islam, M. Greiner, Strongly correlated quantum walks in optical lattices, Science **347** (2015). Citado na página 17.
- [9] S. Longhi, Photonic bloch oscillations of correlated particles, Optics letters **36** (2011). Citado na página 17.
- [10] D. O. Krimer, R. Khomeriki, Realization of discrete quantum billiards in a two-dimensional optical lattice, Physical Review A **84** (2011). Citado na página 17.
- [11] L. Landau, Electron motion in crystal lattices, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion **3** (1933). Citado na página 17.
- [12] S. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz **16** (1946). Citado na página 17.
- [13] S. Pekar, J. Phys. USSR **10** (1946). Citado na página 17.
- [14] J. L. C. Júnior, Sólitons, Rev. Brasileira de Física **6** (1980). Citado na página 17.

- [15] A. S. Davydov, Solitons and energy transfer along protein molecules, *Journal of Theoretical Biology* **66** (1977). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 64.
- [16] W. P. Su, J. R. Schrieffer, A. J. Heeger, Solitons in polyacetylene, *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979). Citado 4 vezes nas páginas 17, 35, 64 e 65.
- [17] E. Fermi, P. Pasta, S. Ulam, M. Tsingou, Studies of the nonlinear problems, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States) **266** (1955). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 35.
- [18] P. M. Morse, Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels, *Phys. Rev.* **34** (1929). Citado 3 vezes nas páginas 17, 35 e 37.
- [19] M. Toda, Wave propagation in anharmonic lattices, *Journal of the Physical Society of Japan* **23** (1967). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 35.
- [20] M. Toda, Waves in nonlinear lattice, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **45** (1970). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 35.
- [21] M. Toda, Studies of a non-linear lattice, *Physics Reports* **18** (1975). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 35.
- [22] L. Rayleigh, On waves propagated along the plane surface of an elastic solid, *Proceedings of the London mathematical Society* **1** (1885). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 34.
- [23] A. Slobodnik, Surface acoustic waves and saw materials, *Proceedings of the IEEE* **64** (1976). Citado 2 vezes nas páginas 18 e 64.
- [24] A. P. Mayer, Surface acoustic waves in nonlinear elastic media, *Physics Reports* **256** (1995). Citado 2 vezes nas páginas 18 e 64.
- [25] R. McNeil, M. Kataoka, C. Ford, C. Barnes, D. Anderson, G. Jones, I. Farrer, D. Ritchie, On-demand single-electron transfer between distant quantum dots, *Nature* **477** (2011). Citado na página 18.
- [26] S. Takada, H. Edlbauer, H. V. Lepage, J. Wang, P.-A. Mortemousque, G. Georgiou, C. H. Barnes, C. J. Ford, M. Yuan, P. V. Santos, et al., Sound-driven single-electron transfer in a circuit of coupled quantum rails, *Nature communications* **10** (2019). Citado na página 18.
- [27] J. Luo, S. Li, Z. Ye, R. Xu, H. Yan, J. Zhang, G. Ye, L. Chen, D. Hu, X. Teng, et al., Evidence for topological magnon–phonon hybridization in a 2d antiferromagnet down to the monolayer limit, *Nano Letters* **23** (2023). Citado na página 18.

- [28] M. Xu, K. Yamamoto, J. Puebla, K. Baumgaertl, B. Rana, K. Miura, H. Takahashi, D. Grundler, S. Maekawa, Y. Otani, Nonreciprocal surface acoustic wave propagation via magneto-rotation coupling, *Science advances* **6** (2020). Citado na página 18.
- [29] S. Bose, Quantum communication through an unmodulated spin chain, *Physical Review Letters* **91** (2003). Citado 5 vezes nas páginas 19, 44, 45, 46 e 96.
- [30] P. Drude, Zur elektronentheorie der metalle, *Annalen der Physik* **306** (1900). Citado na página 20.
- [31] F. Bloch, Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern, *Zeitschrift für physik* **52** (1929). Citado na página 20.
- [32] S. H. Simon, *The Oxford solid state basics*, OUP Oxford, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 23.
- [33] R. M. Costa, M. Mendoza, Dedução da matriz do hamiltoniano tight binding usando a discretização da equação de schrödinger, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **42** (2020). Citado na página 22.
- [34] E. Abrahams, P. Anderson, D. Licciardello, T. Ramakrishnan, Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions, *Physical Review Letters* **42**. Citado 3 vezes nas páginas 25, 27 e 28.
- [35] D. Thouless, Electrons in disordered systems and the theory of localization, *Physics Reports* **13** (1974). Citado na página 25.
- [36] R. Zallen, *The physics of amorphous solids*, John Wiley & Sons, 2008. Citado na página 26.
- [37] P. A. Lee, T. Ramakrishnan, Disordered electronic systems, *Reviews of Modern Physics* **57** (1985). Citado 2 vezes nas páginas 28 e 49.
- [38] B. Kramer, A. MacKinnon, Localization: theory and experiment, *Reports on Progress in Physics* **56** (1993). Citado na página 28.
- [39] B. L. Al'Tshuler, P. A. Lee, Disordered electronic systems, *Physics Today* **41** (1988). Citado na página 28.
- [40] D. Belitz, T. Kirkpatrick, The anderson-mott transition, *Reviews of modern physics* **66** (1994). Citado na página 28.
- [41] J. Flores, Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder, *Journal of Physics: Condensed Matter* **1** (1989). Citado na página 29.

- [42] F. A. De Moura, M. L. Lyra, Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder, *Physical Review Letters* **81** (1998). Citado 2 vezes nas páginas [29](#) e [96](#).
- [43] C. G. Fox, Empirically derived relationships between fractal dimension and power law form frequency spectra, *Fractals in geophysics* **131** (1989). Citado na página [29](#).
- [44] M. Paczuski, S. Maslov, P. Bak, Avalanche dynamics in evolution, growth, and depinning models, *Physical Review E* **53** (1996). Citado na página [29](#).
- [45] S. Russ, S. Havlin, I. Webman, Anderson localization in a correlated landscape near the band edge, *Philosophical Magazine B* **77** (1998). Citado na página [29](#).
- [46] J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands. ii. the degenerate band case, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **277** (1964). Citado na página [30](#).
- [47] J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands iii. an improved solution, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **281** (1964). Citado na página [30](#).
- [48] J. Hirsch, Charge-density-wave to spin-density-wave transition in the extended hubbard model, *Physical review letters* **53** (1984). Citado na página [30](#).
- [49] E. Pavarini, E. Koch, J. van den Brink, G. Sawatzky, Quantum materials: Experiments and theory, *Modeling and Simulation* **6** (2016). Citado na página [31](#).
- [50] E. H. Lieb, F. Y. Wu, Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension, *Phys. Rev. Lett.* **20** (1968). Citado na página [31](#).
- [51] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, *Reviews of Modern Physics* **68** (1996). Citado na página [31](#).
- [52] F. Domínguez-Adame, V. Malyshev, F. De Moura, M. Lyra, Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder, *Physical review letters* **91** (2003). Citado na página [32](#).
- [53] F. De Moura, M. Lyra, F. Domínguez-Adame, V. Malyshev, Bloch oscillations in an aperiodic one-dimensional potential, *Physical Review B* **71** (2005). Citado na página [32](#).
- [54] M. Born, R. Oppenheimer, Zur quantentheorie der molekeln, *Annalen der Physik* **84** (1927). Citado na página [33](#).

- [55] M. G. Velarde, From polaron to soliton: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **233** (2010). Citado na página 33.
- [56] F. de Moura, Numerical evidence of electron–soliton dynamics in fermi–pasta–ulam disordered chains, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **253** (2013). Citado 2 vezes nas páginas 33 e 64.
- [57] J.-H. He, J. Gao, H.-Z. Guo, Correlated electron transport assisted by surface acoustic waves in micron-separated quasi-one-dimensional channels, *Applied Physics Letters* **97** (2010). Citado na página 34.
- [58] S. Hermelin, S. Takada, M. Yamamoto, S. Tarucha, A. D. Wieck, L. Saminadayar, C. Bäuerle, T. Meunier, Electrons surfing on a sound wave as a platform for quantum optics with flying electrons, *Nature* **477** (2011). Citado na página 34.
- [59] V. Miseikis, J. Cunningham, K. Saeed, R. O’Rorke, A. Davies, Acoustically induced current flow in graphene, *Applied Physics Letters* **100** (2012). Citado na página 34.
- [60] A. S. Davydov, Solitons in molecular systems, *Physica Scripta* **20** (1979). Citado 2 vezes nas páginas 35 e 64.
- [61] M. G. Velarde, W. Ebeling, D. Hennig, C. Neißner, On soliton-mediated fast electric conduction in a nonlinear lattice with morse interactions, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **16** (2006). Citado na página 37.
- [62] P. Weiss, L’hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique, *J. Phys. Theor. Appl.* **6** (1907). Citado na página 38.
- [63] W. Heisenberg, Mehrkörperproblem und resonanz in der quantenmechanik, *Zeitschrift für Physik* **38** (1926). Citado na página 38.
- [64] W. Heisenberg, Zur theorie des ferromagnetismus, *Zeitschrift für Physik* **49** (1928). Citado na página 38.
- [65] P. A. M. Dirac, On the theory of quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **112** (1926). Citado na página 38.
- [66] P. A. M. Dirac, Quantum mechanics of many-electron systems, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **123** (1929). Citado na página 38.
- [67] F. Bloch, Zur theorie des ferromagnetismus, *Zeitschrift für Physik* **61** (1950). Citado na página 40.
- [68] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, Cambridge university press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 46.

- [69] S. Bose, Quantum communication through spin chain dynamics: an introductory overview, *Contemporary Physics* **48** (2007). Citado na página [44](#).
- [70] J. J. Sakurai, E. D. Commins, *Modern quantum mechanics*, revised edition (1995). Citado na página [46](#).
- [71] S. Barnett, *Quantum information*, Oxford University Press, 2009. Citado na página [47](#).
- [72] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, Quantum entanglement, *Reviews of modern physics* **81** (2009). Citado na página [47](#).
- [73] M. Nielsen, I. Chuang, *Quantum circuits quantum computation and quantum information* (2002). Citado na página [47](#).
- [74] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, W. K. Wootters, Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels, *Physical review letters* **70** (1993). Citado na página [47](#).
- [75] W. K. Wootters, Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits, *Physical Review Letters* **80** (1998). Citado 2 vezes nas páginas [48](#) e [96](#).
- [76] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Metal-insulator transitions, *Reviews of modern physics* **70** (1998). Citado na página [49](#).
- [77] W. Dias, M. Lyra, Non monotonic influence of hubbard interaction on the anderson localization of two-electron wavepackets, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **411** (2014). Citado na página [49](#).
- [78] D. Shepelyansky, Coherent propagation of two interacting particles in a random potential, *Physical review letters* **73** (1994). Citado na página [49](#).
- [79] W. Dias, E. Nascimento, M. Lyra, F. de Moura, Dynamics of two interacting electrons in anderson-hubbard chains with long-range correlated disorder: Effect of a static electric field, *Physical Review B* **81** (2010). Citado na página [49](#).
- [80] W. Dias, M. Lyra, F. De Moura, The role of hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons, *Physics Letters A* **374** (2010). Citado na página [49](#).
- [81] W. Dias, E. Nascimento, M. Lyra, F. De Moura, Frequency doubling of bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field, *Physical Review B* **76** (2007). Citado na página [49](#).
- [82] A. Melnikov, L. Fedichkin, Entanglement dynamics of two electrons in noisy quantum walks, in: *2017 Progress In Electromagnetics Research Symposium-Spring (PIERS)*, 2017. Citado na página [50](#).

- [83] F. Nammias, Thermodynamic properties of two electrons quantum dot with harmonic interaction, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **508** (2018). Citado na página 50.
- [84] P.-F. Loos, P. M. Gill, A tale of two electrons: Correlation at high density, *Chemical Physics Letters* **500** (2010). Citado na página 50.
- [85] A. Peixoto, W. Dias, The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk, *Solid State Communications* **242** (2016). Citado na página 50.
- [86] M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, T. Menke, D. Borgnia, P. M. Preiss, F. Grusdt, A. M. Kaufman, M. Greiner, Microscopy of the interacting harper–hofstadter model in the two-body limit, *Nature* **546** (2017). Citado na página 50.
- [87] S. Mukherjee, M. Valiente, N. Goldman, A. Spracklen, E. Andersson, P. Öhberg, R. R. Thomson, Observation of pair tunneling and coherent destruction of tunneling in arrays of optical waveguides, *Physical Review A* **94** (2016). Citado na página 50.
- [88] Y. Lahini, M. Verbin, S. D. Huber, Y. Bromberg, R. Pugatch, Y. Silberberg, Quantum walk of two interacting bosons, *Phys. Rev. A* **86** (2012). Citado na página 50.
- [89] P. Kurzhals, G. Kremer, T. Jaouen, C. W. Nicholson, R. Heid, P. Nagel, J.-P. Castellán, A. Ivanov, M. Muntwiler, M. Rumo, et al., Electron-momentum dependence of electron-phonon coupling underlies dramatic phonon renormalization in $\text{Yn}_2\text{b}_2\text{c}$, *Nature Communications* **13** (2022). Citado na página 64.
- [90] R. P. Chatelain, V. R. Morrison, B. L. Klarenaar, B. J. Siwick, Coherent and incoherent electron-phonon coupling in graphite observed with radio-frequency compressed ultrafast electron diffraction, *Physical review letters* **113** (2014). Citado na página 64.
- [91] T. Konstantinova, J. D. Rameau, A. H. Reid, O. Abdurazakov, L. Wu, R. Li, X. Shen, G. Gu, Y. Huang, L. Rettig, et al., Nonequilibrium electron and lattice dynamics of strongly correlated $\text{bi}_2\text{sr}_2\text{cacu}_2\text{o}_{8+\delta}$ single crystals, *Science advances* **4** (2018). Citado na página 64.
- [92] D. Zahn, H. Seiler, Y. W. Windsor, R. Ernstorfer, Ultrafast lattice dynamics and electron–phonon coupling in platinum extracted with a global fitting approach for time-resolved polycrystalline diffraction data, *Structural Dynamics* **8** (2021). Citado na página 64.
- [93] E. J. Meier, F. A. An, B. Gadway, Observation of the topological soliton state in the su–schrieffer–heeger model, *Nature communications* **7** (2016). Citado na página 64.

- [94] T. Astakhova, V. Likhachev, G. Vinogradov, Long-range charge transfer in biopolymers, *Russian Chemical Reviews* **81** (2012). Citado na página [64](#).
- [95] L. Brizhik, A. P. Chetverikov, W. Ebeling, G. Röpke, M. G. Velarde, Electron pairing and coulomb repulsion in one-dimensional anharmonic lattices, *Phys. Rev. B* **85** (2012). Citado na página [64](#).
- [96] L. Brizhik, A. Eremko, Electron autolocalized states in molecular chains, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **81** (1995). Citado na página [64](#).
- [97] O. Cantu Ros, L. Cruzeiro, M. Velarde, W. Ebeling, On the possibility of electric transport mediated by long living intrinsic localized soliton modes, *The European Physical Journal B* **80** (2011). Citado na página [64](#).
- [98] A. Davydov, The lifetime of molecular (davydov) solitons, *Journal of biological physics* **18** (1991). Citado na página [64](#).
- [99] A. Scott, Davydov's soliton, *Physics Reports* **217** (1992). Citado 2 vezes nas páginas [64](#) e [84](#).
- [100] M. G. Velarde, C. NEIBNER, Soliton-mediated electron pairing, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **18** (2008). Citado na página [64](#).
- [101] M. G. Velarde, W. Ebeling, A. P. Chetverikov, Numerical evidence of soliton-mediated electron pairing in heated anharmonic crystal lattices, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **21** (2011). Citado na página [64](#).
- [102] M. Kataoka, M. Astley, A. Thorn, C. Barnes, C. Ford, D. Anderson, G. Jones, I. Farrer, D. Ritchie, M. Pepper, Investigation of single-electron dynamics in tunnelling between zero-and one-dimensional states, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **40** (2008). Citado na página [64](#).
- [103] M. Kataoka, M. R. Astley, A. L. Thorn, D. K. L. Oi, C. H. W. Barnes, C. J. B. Ford, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, D. A. Ritchie, M. Pepper, Coherent time evolution of a single-electron wave function, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009). Citado na página [65](#).
- [104] T.-K. Hsiao, A. Rubino, Y. Chung, S.-K. Son, H. Hou, J. Pedrós, A. Nasir, G. Éthier-Majcher, M. J. Stanley, R. T. Phillips, et al., Single-photon emission from single-electron transport in a saw-driven lateral light-emitting diode, *Nature communications* **11** (2020). Citado na página [65](#).
- [105] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, OUP Oxford, 1987. Citado 2 vezes nas páginas [68](#) e [85](#).

- [106] J. Dos Santos, M. Sales, A. R. Neto, F. de Moura, Dynamics of interacting electrons under effect of a morse potential, *Physical Review E* **95** (2017). Citado na página [70](#).
- [107] M. O. Sales, F. A. B. F. de Moura, Electron–soliton dynamics in chains with cubic nonlinearity, *Journal of Physics: Condensed Matter* **26** (2014). Citado na página [70](#).
- [108] C. Chen, Y. Li, J. Zhang, Characteristics of magnon-phonon coupling in magnetic insulator based on the boltzmann equation, *AIP Advances* **13** (2023). Citado na página [78](#).
- [109] X. Zhang, Y. Zhang, S. Okamoto, D. Xiao, Thermal hall effect induced by magnon-phonon interactions, *Physical Review Letters* **123** (2019). Citado na página [78](#).
- [110] R. Sasaki, Y. Nii, Y. Onose, Magnetization control by angular momentum transfer from surface acoustic wave to ferromagnetic spin moments, *Nature communications* **12** (2021). Citado na página [78](#).
- [111] J. Li, H. T. Simensen, D. Reitz, Q. Sun, W. Yuan, C. Li, Y. Tserkovnyak, A. Brataas, J. Shi, Observation of magnon polarons in a uniaxial antiferromagnetic insulator, *Physical Review Letters* **125** (2020). Citado na página [78](#).
- [112] D. Morais, M. Lyra, F. de Moura, W. Dias, The self-trapping transition of one-magnon excitations coupled to acoustic phonons, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **506** (2020). Citado na página [78](#).
- [113] M. Sales, A. R. Neto, F. de Moura, Spin-wave dynamics in nonlinear chains with spin-lattice interactions, *Physical Review E* **98** (2018). Citado 2 vezes nas páginas [78](#) e [84](#).
- [114] M. Sales, A. R. Neto, F. de Moura, Magnon-lattice dynamics in a heisenberg–morse model with spin–lattice interaction, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **443** (2023). Citado na página [78](#).
- [115] P. M. Morse, Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational Levels, *Physical Review* **34** (1929). Citado na página [79](#).
- [116] P. Christiansen, J. Eilbeck, V. Enol’skii, J. B. Gaididei, On ultrasonic davydov solitons and the henon-heiles system, *Physics Letters A* **166** (1992). Citado na página [79](#).
- [117] D. Hennig, C. Neissner, M. Velarde, W. Ebeling, Effect of anharmonicity on charge transport in hydrogen-bonded systems, *Physical Review B* **73** (2006). Citado na página [79](#).

- [118] A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde, Dissipative solitons and complex currents in active lattices, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **16** (2006). Citado na página [79](#).
- [119] D. Hennig, A. Chetverikov, M. Velarde, W. Ebeling, Electron capture and transport mediated by lattice solitons, *Physical Review E* **76** (2007). Citado na página [84](#).
- [120] M. G. Velarde, W. Ebeling, C. Neißner, On the possibility of electric conduction mediated by dissipative solitons, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **16** (2006). Citado na página [85](#).
- [121] H. Yuan, Y. Cao, A. Kamra, R. A. Duine, P. Yan, Quantum magnonics: When magnon spintronics meets quantum information science, *Physics Reports* **965** (2022). Citado na página [95](#).
- [122] M. Amundsen, I. V. Bobkova, A. Kamra, Magnonic spin joule heating and rectification effects, *Physical Review B* **106** (2022). Citado na página [95](#).
- [123] J. Han, P. Zhang, J. T. Hou, S. A. Siddiqui, L. Liu, Mutual control of coherent spin waves and magnetic domain walls in a magnonic device, *Science* **366** (2019). Citado na página [95](#).
- [124] B. Divinskiy, H. Merbouche, V. Demidov, K. Nikolaev, L. Soumah, D. Gouéré, R. Lebrun, V. Cros, J. B. Youssef, P. Bortolotti, et al., Evidence for spin current driven bose-einstein condensation of magnons, *Nature communications* **12** (2021). Citado na página [95](#).
- [125] T. Wimmer, M. Althammer, L. Liensberger, N. Vlietstra, S. Geprägs, M. Weiler, R. Gross, H. Huebl, Spin transport in a magnetic insulator with zero effective damping, *Physical Review Letters* **123** (2019). Citado na página [95](#).
- [126] O. V. Marchukov, A. G. Volosniev, M. Valiente, D. Petrosyan, N. Zinner, Quantum spin transistor with a heisenberg spin chain, *Nature communications* **7** (2016). Citado na página [95](#).
- [127] G. M. Almeida, Interplay between speed and fidelity in off-resonant quantum-state-transfer protocols, *Physical Review A* **98** (2018). Citado na página [95](#).
- [128] G. Gualdi, V. Kostak, I. Marzoli, P. Tombesi, Perfect state transfer in long-range interacting spin chains, *Physical Review A* **78** (2008). Citado na página [95](#).
- [129] G. M. Almeida, F. Ciccarello, T. J. Apollaro, A. M. Souza, Quantum-state transfer in staggered coupled-cavity arrays, *Physical Review A* **93** (2016). Citado na página [95](#).

- [130] P. Serra, A. Ferrón, O. Osenda, Exact solution of a family of staggered heisenberg chains with conclusive pretty good quantum state transfer, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **55** (2022). Citado na página [95](#).
- [131] T. J. G. Apollaro, S. Lorenzo, A. Sindona, S. Paganelli, G. Giorgi, F. Plastina, Many-qubit quantum state transfer via spin chains, *Physica Scripta* **2015** (2015). Citado na página [95](#).
- [132] G. M. Almeida, F. A. de Moura, M. L. Lyra, Quantum-state transfer through long-range correlated disordered channels, *Physics Letters A* **382** (2018). Citado na página [96](#).
- [133] D. Nunes, A. R. Neto, F. de Moura, Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **410** (2016). Citado na página [97](#).
- [134] F. de Moura, Dynamics of one-electron in a one-dimensional systems with an aperiodic hopping distribution, *International Journal of Modern Physics C* **22** (2011). Citado na página [125](#).

Apêndices

APÊNDICE A . Desenvolvimento dos cálculos da Fidelidade

A fidelidade média da comunicação quântica através do canal sobre os estados puros $|\psi_{in}\rangle$ é

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

no qual a integração é realizada sob a esfera de Bloch (ver Fig. 11), com elemento de ângulo sólido $d\Omega$. Manipulando o integrando da Eq.(A.1) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle &= \langle \psi_{in} | (P(t_0) |\psi_{out}(t_0)\rangle \langle \psi_{out}(t_0)| + [1 - P(t_0)] |0\rangle \langle 0|) | \psi_{in} \rangle \\ &= \underbrace{P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle}_{\text{I}} + \underbrace{\langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle}_{\text{II}} - \\ &\quad - \underbrace{P(t_0) \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle}_{\text{III}}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Assim, será calculado cada termo individualmente. Desenvolvendo **I**

$$\begin{aligned} P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle &= P(t_0) (\alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1|) (\alpha |0\rangle + \beta f_{r,s}(t_0) |1\rangle) [P(t_0)]^{-1/2} \\ &\quad (\alpha^* \langle 0| + \beta^* f_{r,s}^*(t_0) \langle 1|) [P(t_0)]^{-1/2} (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) \\ &= (\alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1|) (\alpha |0\rangle + \beta f_{r,s}(t_0) |1\rangle) \\ &\quad (\alpha^* \langle 0| + \beta^* f_{r,s}^*(t_0) \langle 1|) (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) \\ &= [|\alpha|^2 \langle 0|0\rangle + \alpha^* \beta f_{r,s}(t_0) \langle 0|1\rangle + \beta^* \alpha \langle 1|0\rangle + |\beta|^2 f_{r,s}(t_0) \langle 1|1\rangle] \\ &\quad [|\alpha|^2 \langle 0|0\rangle + \alpha^* \beta \langle 0|1\rangle + \beta^* f_{r,s}^*(t_0) \alpha \langle 1|0\rangle + |\beta|^2 f_{r,s}^*(t_0) \langle 1|1\rangle] \\ &= [|\alpha|^2 + |\beta|^2 f_{r,s}(t_0)] [|\alpha|^2 + |\beta|^2 f_{r,s}^*(t_0)] \\ &= |\alpha|^4 + |\alpha|^2 |\beta|^2 f_{r,s}^*(t_0) + |\alpha|^2 |\beta|^2 f_{r,s}(t_0) + |\beta|^4 |f_{r,s}(t_0)|^2. \end{aligned}$$

Tomando $\alpha = \cos(\theta/2)$ e $\beta = e^{i\phi} \sin(\theta/2)$, tem-se

$$\begin{aligned} P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle &= \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) f_{r,s}^*(t_0) + \\ &\quad + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) f_{r,s}(t_0) + \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) |f_{r,s}(t_0)|^2. \end{aligned}$$

Desenvolvendo **II**

$$\begin{aligned} \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle &= (\alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1|) |0\rangle \langle 0| (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) \\ &= (\alpha^* \langle 0|0\rangle + \beta^* \langle 1|0\rangle) (\alpha \langle 0|0\rangle + \beta \langle 0|1\rangle) \\ &= |\alpha|^2 = \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right). \end{aligned}$$

Desenvolvendo **III**

$$\begin{aligned}
-P(t_0) \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle &= -P(t_0) (\alpha^* \langle 0 | + \beta^* \langle 1 |) | 0 \rangle \langle 0 | (\alpha | 0 \rangle + \beta | 1 \rangle) \\
&= -P(t_0) (\alpha^* \langle 0 | 0 \rangle + \beta^* \langle 1 | 0 \rangle) (\alpha \langle 0 | 0 \rangle + \beta \langle 0 | 1 \rangle) \\
&= -P(t_0) |\alpha|^2 = -P(t_0) \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right).
\end{aligned}$$

Portanto, a Eq.(A.2) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle &= \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) f_{r,s}^*(t_0) + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) f_{r,s}(t_0) + \\
&+ \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) |f_{r,s}(t_0)|^2 + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - P(t_0) \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \\
&= \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) (f_{r,s}^*(t_0) + f_{r,s}(t_0)) + \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) |f_{r,s}(t_0)|^2 + \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) \\
&+ \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - P(t_0) \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right). \tag{A.3}
\end{aligned}$$

Mas,

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

Assim, a fidelidade dada pela Eq.(A.1) é

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

Como a integral não depende de ϕ , logo,

$$\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} \int_0^\pi \left[\cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) (f_{r,s}^*(t_0) + f_{r,s}(t_0)) + \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) |f_{r,s}(t_0)|^2 \right. \\
&+ \left. \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) |f_{r,s}(t_0)|^2 \right] \sin \theta d\theta. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Cada integral vai ser resolvida separadamente, assim,

$$\begin{aligned}
\mathbf{IV} &= \frac{1}{2}(f_{r,s}(t_0) + f_{r,s}^*(t_0)) \int_0^\pi \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta \\
&= \frac{1}{2}(f_{r,s}(t_0) + f_{r,s}^*(t_0)) \int_0^\pi \left[1 - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right] \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta \\
&= \frac{1}{2}(f_{r,s}(t_0) + f_{r,s}^*(t_0)) \left[\underbrace{\int_0^\pi \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta}_{\mathbf{IV}_1} - \underbrace{\int_0^\pi \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta}_{\mathbf{IV}_2} \right] \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

Para resolver \mathbf{IV}_1 , é tomado a seguinte substituição: $u = \sin^2(\theta/2) = (1 - \cos \theta)/2 \Rightarrow du = [(\sin \theta)/2]d\theta$, logo,

$$\mathbf{IV}_1 = 2 \int u du = u^2 + C,$$

ou melhor,

$$\mathbf{IV}_1 = \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)_0^\pi = \sin^4\left(\frac{\pi}{2}\right) - \sin^4(0) = 1. \quad (\text{A.7})$$

Agora, resolvendo \mathbf{IV}_2

$$\begin{aligned}
\mathbf{IV}_2 &= \int_0^\pi \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta = \frac{1}{16} \int_0^\pi (5 \sin \theta - 4 \cos 2\theta + \sin 3\theta) d\theta \\
&= \frac{1}{16} \left[-5 \cos \theta - 4 \left(-\frac{\cos 2\theta}{2} \right) - \frac{\cos 3\theta}{3} \right]_0^\pi = \frac{1}{16} \left[-5(-1 - 1) + 2(1 - 1) - \frac{1}{3}(-1 - 1) \right] \\
&= \frac{1}{16} \left(10 + \frac{2}{3} \right) = \frac{2}{3}. \quad (\text{A.8})
\end{aligned}$$

Portanto, a Eq.(A.6) é reescrita como

$$\mathbf{IV} = \frac{1}{2}(f_{r,s}(t_0) + f_{r,s}^*(t_0)) \left(1 - \frac{2}{3} \right) = \frac{1}{6}(f_{r,s}(t_0) + f_{r,s}^*(t_0)). \quad (\text{A.9})$$

A integral

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2}|f_{r,s}(t_0)|^2 \int_0^\pi \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta \quad (\text{A.10})$$

é a mesma de \mathbf{IV}_2 , logo,

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2}|f_{r,s}(t_0)|^2 \frac{2}{3} = \frac{|f_{r,s}(t_0)|^2}{3}. \quad (\text{A.11})$$

A próxima é

$$\mathbf{VI} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin \theta d\theta, \quad (\text{A.12})$$

onde para resolve-lá deve-se tomar as seguintes substituições

$$u = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \Rightarrow du = -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta = -\frac{\sin \theta}{2} d\theta \Rightarrow -2du = \sin \theta d\theta.$$

Assim,

$$\mathbf{VI} = - \int u du = -\frac{u^2}{2} + C = -\frac{1}{2} \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \Big|_0^\pi = \frac{1}{2}. \quad (\text{A.13})$$

A última é

$$\mathbf{VII} = -\frac{1}{2} |f_{r,s}(t_0)|^2 \int_0^\pi \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin \theta d\theta,$$

que se trata da integral **IV**, logo,

$$\mathbf{VII} = -\frac{1}{2} \frac{1}{3} |f_{r,s}(t_0)|^2 = -\frac{1}{6} |f_{r,s}(t_0)|^2. \quad (\text{A.14})$$

Portanto, a fidelidade dada pela Eq.(A.5) pode ser reescrita usando as Eqs.(A.9), (A.11), (A.13) e (A.14) da seguinte forma:

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

Para reescrever o primeiro termo da Eq.(A.15) é preciso notar que $f_{r,s}(t_0) = |f_{r,s}(t_0)|e^{i\gamma}$, onde $\gamma = \arg \{f_{r,s}(t_0)\}$, então

$$\begin{aligned} f_{r,s}^*(t_0) + f_{r,s}(t_0) &= |f_{r,s}(t_0)|e^{-i\gamma} + |f_{r,s}(t_0)|e^{i\gamma} \\ &= |f_{r,s}(t_0)|(e^{i\gamma} + e^{-i\gamma}) \\ &= 2|f_{r,s}(t_0)| \frac{(e^{i\gamma} + e^{-i\gamma})}{2} \\ &= 2|f_{r,s}(t_0)| \cos \gamma. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Substituindo a Eq.(A.16) na Eq.(A.15), tem-se

$$F = \frac{1}{2} + \frac{|f_{r,s}(t_0)|}{3} \cos \gamma + \frac{|f_{r,s}(t_0)|^2}{6}. \quad (\text{A.17})$$

Para a fidelidade máxima é preciso escolher o campo magnético B , de modo que, $\cos \gamma = 1$ e que as amplitudes de oscilação sejam em toda a rede, ou seja, $f_{r,s}(t_0) = f_N(t)$, logo,

$$F = \frac{1}{2} + \frac{|f_N(t)|}{3} + \frac{|f_N(t)|^2}{6}. \quad (\text{A.18})$$

APÊNDICE B . Cálculos da Concorrência

Desenvolvendo o produto tensorial

$$\tilde{\rho} = (\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\begin{aligned} \sigma^y \otimes \sigma^y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{11}^y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_{12}^y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_{12}^y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_{22}^y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & 0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Logo,

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= (\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & d & 0 \\ 0 & c & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & e & 0 \\ 0 & b & d & 0 \\ -a & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & c & 0 \\ 0 & d & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Portanto, a matriz não-Hermitiana $\rho\tilde{\rho}$ é dada por

$$\rho\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & d & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & c & 0 \\ 0 & d & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & be + cd & 2bc & 0 \\ 0 & 2de & be + cd & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

onde $be + cd = 2|f_i|^2|f_j|^2 = \kappa_1$, $2bc = 2|f_i|^2 f_i f_j^* = \kappa_2$ e $2de = |f_j|^2 f_i^* f_j = \kappa_3$. Agora, calculando os autovalores de $\rho\tilde{\rho}$ usando a relação

$$\det(\rho\tilde{\rho} - \lambda I) = 0 \Rightarrow \det \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_1 & \kappa_2 & 0 \\ 0 & \kappa_3 & \kappa_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = 0$$

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_1 - \lambda & \kappa_2 & 0 \\ 0 & \kappa_3 & \kappa_1 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Para encontrar o determinante dessa matriz, será usado o Teorema de Laplace. Escolhendo a primeira linha é possível obter que

$$\begin{aligned} a_{11}A_{11} + a_{12}A_{12} + a_{13}A_{13} + a_{14}A_{14} &= 0 \\ -\lambda(-1)^2 D_{11} + 0(-1)^3 D_{12} + 0(-1)^4 D_{13} + 0(-1)^5 D_{14} &= 0 \\ -\lambda \begin{vmatrix} \kappa_1 - \lambda & \kappa_2 & 0 \\ \kappa_3 & \kappa_1 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Desenvolvendo essa equação, é possível chegar a seguinte relação

$$\lambda^2[\lambda^2 - 2\kappa_1\lambda + (\kappa_1^2 - \kappa_2\kappa_3)] = 0. \quad (\text{B.6})$$

Através da Eq.(B.6) já é possível obter duas raízes, são elas: $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$. Agora, desenvolvendo a equação de 2º grau para encontrar as raízes restantes. Usando o método de Bhaskara, têm-se

$$\lambda = \frac{2\kappa_1 \pm \sqrt{(-2\kappa_1)^2 - 4(\kappa_1^2 - \kappa_2\kappa_3)}}{2} = \kappa_1 \pm \sqrt{\kappa_2\kappa_3}.$$

Substituindo os respectivos $\{\kappa_i\}$, é obtido que

$$\lambda = 2|f_i|^2|f_j|^2 \pm 2|f_i|^2|f_j|^2. \quad (\text{B.7})$$

Portanto, as raízes restantes são:

$$\lambda_3 = 0 \text{ e } \lambda_4 = 4|f_i|^2|f_j|^2. \quad (\text{B.8})$$

APÊNDICE C . Método de Taylor

O método de Taylor [134] é usado através da expansão de Taylor para o operador de evolução temporal $U(t) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}}$, dada por:

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

onde H é o Hamiltoniano, n_0 é a ordem de truncamento da soma. O estado inicial expresso por $|\psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle$, para um tempo t , o estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser encontrado com a aplicação de $U(t)$ no estado inicial, como segue

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = \left[1 + \sum_{k=1}^{n_0} \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \right] |\psi(0)\rangle. \quad (\text{C.2})$$

Essa expressão pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= |\psi(0)\rangle + \left[\sum_{k=1}^{n_0} \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \right] |\psi(0)\rangle; \\ &= |\psi(0)\rangle + \left[\left(\frac{-iHt}{\hbar} \right) + \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right)^2 \frac{H^2}{2!} + \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right)^3 \frac{H^3}{3!} + \dots \right] |\psi(0)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Com uma pequena análise, é possível notar que cada termo da expansão é acompanhado de uma constante $\left(\frac{-it}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!}$ multiplicada por H^k , logo, para encontrar o estado $|\psi(t)\rangle$ é preciso calcular $H^k |\psi(0)\rangle$. Por exemplo, para calcular $H^1 |\psi(0)\rangle$ faz-se necessário o uso do Hamiltoniano *tight-binding* de um elétron com *hopping* T , ou seja,

$$\begin{aligned} H^1 |\psi(0)\rangle &= H^1 \sum_n f_n(0) |n\rangle; \\ &= \sum_n [T(f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)) + \epsilon_n f_n(0)] |n\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Com $H^1 |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^1 |n\rangle$,

$$C_n^1 = T(f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)) + \epsilon_n f_n(0). \quad (\text{C.5})$$

Para calcular $H^2 |\psi(0)\rangle$, é necessário usar $H^2 |\psi(0)\rangle = H^1(H^1 |\psi(0)\rangle)$, como $H^1 |\psi(0)\rangle$ já foi calculado, toma-se $H^2 |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^2 |n\rangle$, assim,

$$C_n^2 = T(C_{n+1}^1 + C_{n-1}^1) + \epsilon_n C_n^1. \quad (\text{C.6})$$

Portanto, para generalizar $H^k |\psi(0)\rangle$, é preciso definir $H^k |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^k |n\rangle$. Assim, é possível escrever C_n^k para um dado k qualquer da seguinte forma:

$$C_n^k = T(C_{n+1}^{k-1} + C_{n-1}^{k-1}) + \epsilon_n C_n^{k-1}, \quad (\text{C.7})$$

logo, a seguinte relação é obtida:

$$f_n(t) = \sum_{k=0}^{n_0} C_n^k \left(\frac{-it}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!}, \quad (\text{C.8})$$

onde $C_n^0 = C_n(t=0)$. Com isso, o cálculo de $H^k |\psi(0)\rangle$ é possível e a obtenção da solução numérica para o estado quântico do sistema no tempo t . Portanto, para obter a solução numérica em um dado tempo t_m , deve-se aplicar o método de forma sucessiva.

Anexos

ANEXO A . Artigo: Estados ligados
cooperativos em caminhadas quânticas de
partículas interagentes



Cooperative bound states in quantum walks of interacting particles

M.F.V. Oliveira^a, M.S. Santos Junior^a, Michele B. Coêlho^b, F.A.B.F. de Moura^a,
W.S. Dias^{a,*}

^a Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-900 Maceió, Alagoas, Brazil

^b Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 91501-970 Porto Alegre, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:

Quantum walks
Interacting particles
Bound states
Bloch oscillations

ABSTRACT

Although multiparticle quantum walks have been claimed to be universal for quantum computing, fundamental issues still need further understanding, such as the formation of bound states and their role in particle dynamics. By considering the framework of two-particle quantum walks, we study particles with short- or long-range interactions between them and observe the emergence of local and non-local bound states associated with these interactions. We show that such bound states can perform competitive and cooperative influence with existing states, sometimes resulting in unusual dynamics. In addition to revealing the optimal scenarios for particles to perform coherent dynamics, we also show that cooperative scenarios between bound states are responsible for robustly correlated quantum walks. Thus, coherent dynamics of particles can be maintained even for strong interaction strengths, avoiding the nonmonotonic behavior exhibited by systems with only on-site interaction.

1. Introduction

Quantum walks have attracted much attention recently, not only for being a versatile and highly controllable platform for studying quantum systems but also for their promising character of performing quantum computing. Coherent superposition and quantum interference are responsible for different dynamics from their classical analog, well-known for stochastic motion. Understanding the role played by underlying quantum states is one of the key points, which becomes even more challenging when more than one particle is walking simultaneously.

Quantum effects are considerably enhanced when two or more quantum walkers are simultaneously present, such that systems with many interacting quantum walkers have been considered to perform universal and efficient quantum computation [1–3]. However, the Hilbert space describing multiparticle quantum walks grows exponentially with the linear increase in particle number and the lattice size [4]. Thus, studies with low density of particles have been explored, presenting valuable results. The additional power shown by quantum walks of interacting particles for distinguishing nonisomorphic strongly regular graphs is an example [5]. Algorithms based on two interacting particles can distinguish nonisomorphic graphs that non-interacting particles cannot. Such an increase in distinguishing power is associated with spatial correlations and entanglement between particles undergoing the quantum walk [6]. Furthermore, two-particle interacting quantum walks have also been explored for information protection and the development of safer quantum protocols [7].

The weakening of Anderson localization in disordered or aperiodic quantum walks as a function of interaction between particles is another scenario. Initially described by persistent currents in the presence of Coulomb interaction [8,9], this phenomenon is recovered by two particles walking in a disordered lattice [10]. More recent studies unveil the nonmonotonic character of such

* Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.physa.2024.129697>

Received 2 December 2023; Received in revised form 28 February 2024

Available online 18 March 2024

0378-4371/© 2024 Elsevier B.V. All rights reserved.

weakening [11,12], in agreement with results reported for multiparticle systems [13–17]. A decrease in the degree of localization has also been reported in quantum walks assisted by particle-number changes [18]. Such number-changing interactions still decrease mixing and hitting times on binary trees, a structure of interest in quantum computing [19,20].

An essential prerequisite for validation and realization of high-fidelity quantum information processing, experimental control over the dynamics of quantum multi-particle systems has recently been demonstrated. Two-particle quantum walks were initially implemented on an integrated waveguide architecture within a discrete-time framework, which explored the quantum dynamics of noninteracting bosonic or fermionic particles [21]. Bosonic atoms in an optical lattice were used to implement two-particle quantum walks with tunable interactions [22]. As a result, it was reported that particles can form a stable repulsively bound pair with effective single-particle behavior and perform Bloch oscillations with a specific frequency. Analogous results have been experimentally achieved with photons in a waveguide array [23] and designed electric circuits [24], demonstrating the possibility of accessing and controlling quantum states across different frameworks. This behavior, characterized by twice the fundamental frequency, corroborates the theoretical prediction in Ref. [25]. Such bound pair of particles behaving as a molecule has been shown either by considering discrete-time quantum walks [26] as for a Thirring walk, a quantum walk based on the two-particle sector of a quantum cellular automata [27,28].

More recent studies have explored quantum walks with three or more particles. Larger clusters of interacting particles can exhibit fractional Bloch oscillations, with frequencies proportional to the number of particles clustered in a bound state [29]. Quantum walks of interacting indistinguishable particles point out three-boson bound states as an ideal metrological state for the precision measurement of gravitational force [30]. Studies considering different particles on the walk have reported the formation of intercomponent bound states [31] and quantum correlations between noninteracting particles mediated by an additional third particle [32].

Despite notable advancements [33–35], there remains a need for a deeper understanding of quantum walks involving interacting particles. Exploring the formation of bound states comprising multiple particles and their effects on particle behavior holds the potential to establish specific quantum logical correlations and operations that might otherwise be unattainable. Furthermore, this research subject is closely intertwined with crucial physics and quantum technology elements, including an in-depth survey of fundamental quantum properties such as entanglement and superposition, advancing more efficient quantum circuits, and optimizing quantum computing at the hardware level. Our objective here is to investigate whether nonlocal interactions between particles are responsible for the emergence of different bound states and to examine the behavior of particles in the presence of multiple coexisting bound states. To address such questions, we consider the well-established extended Hubbard model [36] over a theoretical framework of two-interacting particle quantum walks. Numerical analysis shows the emergence of different bound states as we consider the particles interacting at a distance. Our findings advance the understanding of the interplay between available states in a quantum walk, unveiling the existence of cooperative aspects between bound states and competitive regimes between existing states. As a consequence, unusual quantum correlations are established. We report that cooperative scenarios between bound states can promote robustly correlated quantum walks, where coherent dynamics are maintained even for strong interaction strengths. Optimal scenarios for achieving such coherent dynamics in different interparticle interaction ranges are shown.

2. Model and formalism

Quantum walks have been fundamental in exploring complex quantum systems, offering a powerful tool for quantum simulation and algorithms [37–40]. Both frameworks, discrete- and continuous-time, have allowed for modeling a wide range of physical phenomena and addressing advanced computational challenges. Introduced by Aharonov et al. [41], discrete-time quantum walks design the walker advancing through discrete steps dictated by a dynamic internal degree of freedom, effectively performing as a quantum coin. While recognizing the significant results for two-interacting particles in discrete-time quantum walks [26–28], we consider continuous-time quantum walks, whose connection with their classical counterpart is established based on the analogy between the quantum mechanical Hamiltonian and the classical transfer matrix [42]. Thus, the walker hops to adjacent nodes on a graph following the time-dependent Schrödinger equation.

The problem involves analyzing the quantum walk of two interacting particles in one-dimensional lattices with N sites. As a step towards understanding the effect of nonlocal interactions on such systems, we consider an extended version of the Hubbard model that considers particles with nearest-neighbor interaction in addition to on-site interaction [36]. The following Hamiltonian describes the system

$$H = \sum_{n,\alpha=a,b} [J(\hat{b}_{n+1,\alpha}^\dagger \hat{b}_{n,\alpha} + \hat{b}_{n,\alpha}^\dagger \hat{b}_{n+1,\alpha}) + Fnd\hat{\eta}_{n,\alpha}] + \sum_n [U(\hat{\eta}_{n,a}\hat{\eta}_{n,b}) + V(\hat{\eta}_{n,a}\hat{\eta}_{n+1,b} + \hat{\eta}_{n+1,a}\hat{\eta}_{n,b})]. \quad (1)$$

Here, $\hat{b}_{n,\alpha}$ ($\hat{b}_{n,\alpha}^\dagger$) is the annihilation (creation) operator of particle α [$\alpha \in (a, b)$] at site n . $\hat{\eta} = b_{n,\alpha}^\dagger b_{n,\alpha}$ is the corresponding particle number operator and J is the single-particle tunneling amplitude between neighboring sites. The on-site and nearest-neighbor interactions between two distinguishable bosons (or fermions with opposite spins) are denoted by U and V , respectively. d is the lattice spacing and F is the constant force. By introducing an external force, we can utilize well-established outcomes as a benchmark, as the specific frequency of Bloch oscillations serves as a distinctive signature of correlated particle motion resulting from forming bound states between them [25]. An experimental setup can be achieved and precisely controlled by employing ultracold atoms trapped in a sufficiently deep lattice potential [22,43]. The hopping and interaction terms depend on the depth of

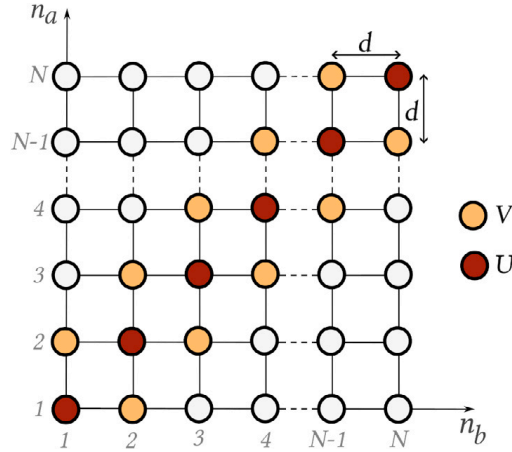


Fig. 1. A quantum-walk graph corresponding to two-interacting particles described by Hamiltonian in Eq. (1). Two discrete indices (n_a, n_b) identify each node representing the basis states $|n_a, n_b\rangle$. Nodes on the main ($n_a = n_b$) and nearest-neighbor ($n_a = n_b \pm 1$) diagonals account for on-site (U) and nearest-neighbor (V) interaction between particles, respectively.

the optical lattice potential and the Feshbach resonance framework, with a lattice tilt providing the necessary F . Recent progress in electrical circuits [24] and superconducting processors [44,45] also positions them as promising experimental frameworks.

A corresponding quantum-walk model visualizes state transitions in a quantum system as a network of interconnected nodes. The Hamiltonian outlined in Eq. (1) can be mapped by depicting the different states as nodes on a graph, as shown in Fig. 1. In this context, the lattice sites correspond to positions $(n_a, n_b) = (jd, kd)$, where j, k are elements of the sets $[1, N]$ and \mathbb{N}^* . One assumes that the states representing the nodes $|n_a, n_b\rangle = |n_a\rangle \otimes |n_b\rangle$ span the whole accessible Hilbert space $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{n_a} \otimes \mathcal{H}_{n_b}$. Here, \mathcal{H}_{n_a} and \mathcal{H}_{n_b} represent the respective Hilbert spaces of particles a and b . The resulting size of the graph is therefore $N^2 = N \times N = \dim(\mathcal{H})$. Highlighted nodes on the main ($n_a = n_b$) and nearest-neighbor ($n_a = n_b \pm 1$) diagonals account for on-site (U) and nearest-neighbor (V) interaction between particles, respectively.

By considering f_{n_a, n_b} the amplitude probability of finding the particle a at site n_a and the particle b at site n_b of the lattice, we expand the normalized state vector of the system $|\psi(t)\rangle$ in the Wannier representation

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_a, n_b} f_{n_a, n_b}(t) |n_a, n_b\rangle, \quad (2)$$

The evolution equations for the amplitudes f_{n_a, n_b} , obtained from the time-dependent Schrödinger equation, are solved numerically using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator [25]. Thus, the state vector at a time t is given by applying the unitary transformation $|\psi(\Delta t)\rangle = \Gamma(\Delta t)|\psi(t=0)\rangle$ recursively, where

$$\Gamma(\Delta t) = e^{-iH\Delta t/\hbar} = 1 + \sum_{l=1}^{l_f} \frac{(-iH\Delta t/\hbar)^l}{l!}, \quad (3)$$

is the quantum mechanical time evolution operator. The following results were taken by using $\Delta t = 0.05$, and $l_f = 20$. This cutoff was sufficient to keep the wave function norm conservation ($|1 - \sum_{n_a, n_b} |\psi_{n_a, n_b}|^2| \leq 10^{-15}$) along the entire time interval considered. Furthermore, we use dimensionless units $F/J, U/J, V/J$, and set $\hbar = J = d = 1$.

Since the absence of net displacement of the wave-packet centroid is achieved for an initial Fock state with the particles occupying a single site [46,47], we consider an initial Gaussian wave packet with width σ

$$\langle n_a, n_b | \psi(t=0) \rangle = \frac{1}{A} e^{-[(n_a - n_a^0)^2 + (n_b - n_b^0)]/4\sigma^2}, \quad (4)$$

centered at the initial positions (n_a^0, n_b^0) , with $n_a^0 = N/2$ and $n_b^0 = N/2$. A is a normalization factor. Preliminary studies have indicated no notable variations when investigating system sizes ranging from $N = 100$ to $N = 250$. To maintain wave function norm conservation and mitigate edge effects within a viable computational effort, we have opted for lattices with $N = 150$ for the subsequent analysis. Through the above-described protocol, we computed typical quantities that can bring information about particle dynamics, as will be detailed below.

3. Results

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

$$\bar{n}_i(t) = \sum_{n_a, n_b} n_i |f_{n_a, n_b}(t)|^2, \quad i = a, b \quad (5)$$

Due to the symmetry of the initial state and interaction Hamiltonian, one has that $\bar{n}_a(t) = \bar{n}_b(t)$. Using a lattice with $N = 150$ sites, $\sigma = 1$, and $F = 0.5$, we investigated the influence of non-local interaction by evaluating different interaction strengths between

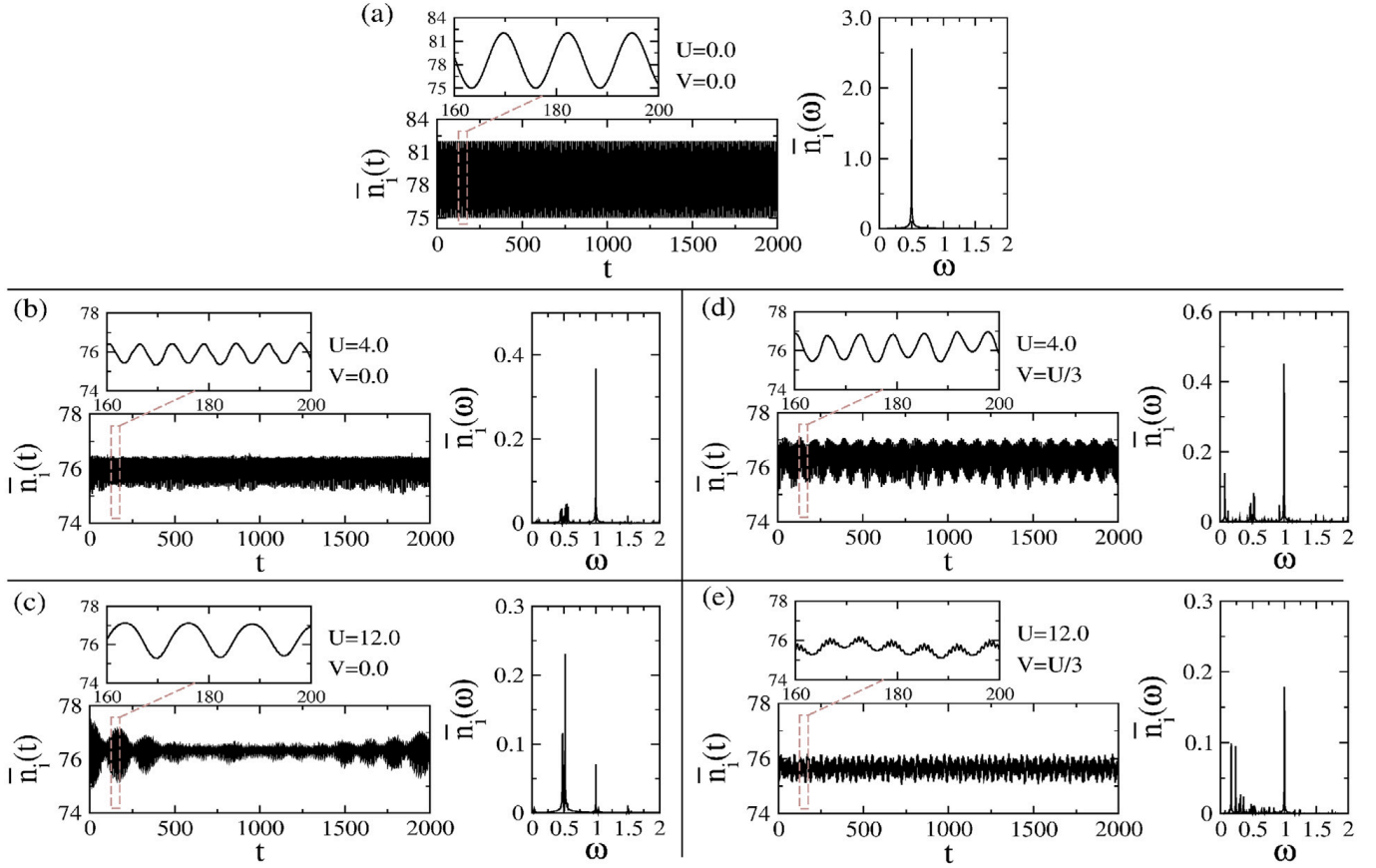


Fig. 2. Time-evolution of wave-packet centroid and the respective Fourier transform for systems with distinct interaction strength between particles: (a) $U = 0$ and $V = 0$; (b) $U = 4$ and $V = 0$; (c) $U = 12$ and $V = 0$; (d) $U = 4$ and $V = U/3$ and (e) $U = 12$ and $V = U/3$. The oscillatory pattern developed by systems with on-site and nearest-neighbor interactions shows a predominant scenario of coherent hopping even for strong interaction strength, differing from the behavior exhibited by systems with only on-site interactions.

particles. Here, we consider a nearest-neighbor interaction to mimic a screening of the Coulomb interaction by orbitals, known to decrease with distance [48]. Thus, we focus on $V = U/3$ without loss of generality for $V < U$. To evaluate the contribution arising from this non-local interaction, we use as reference the case with only on-site interaction ($V = 0.0$) [25]. Such a scenario is shown in Fig. 2a-c for $U = 0.0, 4.0, 12.0$, respectively. We observe all centroids exhibiting an oscillatory pattern consistent with Bloch oscillations. For $U = 0.0$, the system is composed of non-interacting particles. The respective Fourier transform [panel with $\bar{n}_i(\omega)$] clearly shows a predominant oscillation frequency ($\omega = F$) consistent with particles performing independent hopping [49,50]. An oscillatory pattern with a dominant frequency close to $\omega = 2F$ is achieved for $U = 4.0$, which corroborates the scenario of particles hopping coherently [22,23,25]. The wave-packet component corresponding to bound states exhibits signatures of dynamical evolution typical of a single particle composed of the particles pair. The effective local potential felt by this composed particle is proportional to $2Fnd$, thus explaining the observed frequency doubling ($\omega = 2F$). However, the $\omega = F$ frequency is reamplified and becomes predominant for strong enough interactions (here $U = 12.0$). This nonmonotonic behavior demonstrates the competitive character between the existing bound and unbound states. As the interaction increases further, the high energy cost for double occupancy renders coherent particle hopping increasingly unfavorable. Thus, the independent hopping of particles (signaled by the frequency $\omega = F$) becomes predominant over the coherent hopping (signaled by the frequency $\omega = 2F$). In Fig. 2d-e, we examine a system with particles subject to on-site and nearest-neighbor interactions under the same settings as the previous reference scenario. Differing from the reference scenario, we observe a predominant oscillatory pattern with a frequency close to $\omega = 2F$ for both $U = 4.0$ and $U = 12.0$. Considering the emergence of nearest-neighbor bound states due to nearest-neighbor interaction [51], this behavior suggests a cooperative interaction between the different existing bound states, contributing to the predominantly coherent hopping of particles even when they are under strong interaction strengths.

To understand the role played by the nearest-neighbor interaction in sustaining the coherent particle hopping for strong interactions, we explored the long-time average of the double occupancy probability (DOP), probability of occupying neighboring sites (NOP), and next-nearest-neighbor occupancy probability (NNOP). These quantities are computed by using the same lattice size of $N = 150$ sites, $\sigma = 1$, and $F = 0.5$ employed before. In Fig. 3, we show such occupancy probabilities as a function of U , both for $V = 0.0$ and $V = U/3$. Although the particles exhibit independent hopping in the absence of interaction, the external force makes them remain trapped over a finite segment. Thus, we observe non-null values of occupancy probabilities even in the absence of particle-particle interactions. As the interaction is turned on, correlated dynamics of particles are observed. The DOP growth

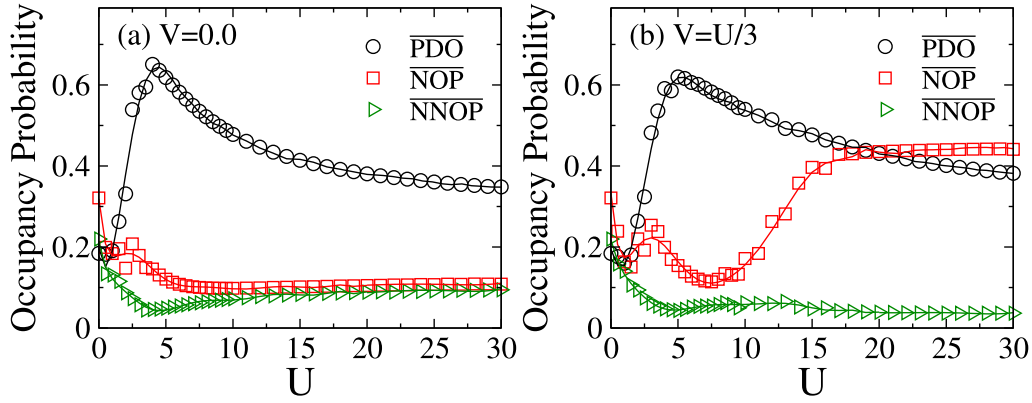


Fig. 3. The time average of occupancy probability versus on-site interaction strength U for quantum walks in which particles present (a) only on-site interaction and (b) on-site and nearest-neighbor interaction. The competitive character between bound and unbound states is responsible for an optimal scenario for the coherent dynamics of particles occupying the same site around $U = 4$. Such coherent hopping is supported for strong U by the emergence of nearest-neighbor bound states, now with particles occupying neighboring sites.

shows the particles predominantly occupying the same site. However, we observe a nonmonotonic behavior in such a correlated dynamic as U increases even more. Such behavior is associated with the emergence of on-site bound states and the competitive effects between them and the unbound states. The first ones, which favor coherent hopping, cover the energy range $U \leq E \leq \sqrt{16 + U^2}$ for systems with only on-site interaction and $U \leq E \leq V + \sqrt{16 + (U - V)^2}$ for systems with on-site and nearest-neighbor interaction between particles [25,51]. The others cover the energy range $-4 \leq E \leq 4$ and correspond to the states of uncorrelated particles. The emergence of U favors the influence of bound states on particle dynamics as the interaction increases. However, the sub-band of bound states separates and moves away from the band of unbound states as the interaction becomes very strong [52]. This scenario favors the predominance of unbound states over particle dynamics. As a result, optimal coherent dynamics are achieved with intermediate interaction strength, leading to Bloch oscillations with both particles predominantly occupying the same sites. This occurrence corresponds to the disentanglement between bound and unbound state sub-bands.

While the described scenario elucidates the reamplification of independent oscillations ($\omega = F$) for strong interactions, as depicted in Fig. 2c, the behavior of systems with both on-site and nearest-neighbor interactions requires explanation. In Fig. 3b, we observe a slower decrease of \overline{DOP} and the upward trend of \overline{NOP} under strong particle–particle interactions. The first observation occurs because of the widening of bound states sub-band in the function of V [51]. The second one is consistent with the emergence of nearest-neighbor states covering the range $V \leq E \leq V + 4/V$ [51]. These states are responsible for a coherent dynamic in which particles occupy neighboring sites. As with on-site bound states, a competitive character promotes the relevance of these states when they are close to detaching from the main band. Such behavior consolidates a cooperative effect between on-site and nearest-neighbor bound states, which favors the maintenance of a coherent dynamic of particles signaled by predominant frequency $\omega = 2F$ for strong interactions in Fig. 2e.

As an additional analysis, we explore in Fig. 4 quantum walks in which the on-site interaction is negligible ($U = 0$) and particles interact only when they are on neighboring sites. Such a system is consistent with Ref. [30] and can be implemented with the current technology of ultracold atoms [22,53]. Fig. 4 shows centroids and the respective Fourier transforms for (a) $V = 4$ and (b) $V = 12$, considering the same lattice size of $N = 150$ sites, $\sigma = 1$, and $F = 0.5$ employed before. We observe coherent Bloch-oscillating quantum walks, signaled by the predominant frequency $\omega = 2F$. Thus, it becomes evident that non-local bound states promote coherent hopping of particles. Unlike the systems where the particles have only on-site interaction, now we observe particles predominantly occupying nearest-neighbor sites. Such an aspect is shown by the behavior of \overline{NOP} in Fig. 4c. We also note the coherent dynamics (frequency doubling) predominating even for strong interaction strengths (here $V = 12$). This scenario is consistent with a higher coherent hopping probability and a slower decay as the interaction between particles is strengthened (compare Fig. 2a to Fig. 4c). Despite this difference, the competitive character between bound and unbound states is still observed, present in the nonmonotonic behavior of \overline{NOP} and the lower amplitude modes in $\overline{n}_i(\omega)$.

Going beyond the scenario with on-site and nearest-neighbor interactions, we investigated the quantum walks with long-range interaction between particles. The following Hamiltonian describes the system:

$$H = \sum_{n,\alpha=a,b} [J(\hat{b}_{n+1,\alpha}^\dagger \hat{b}_{n,\alpha} + \hat{b}_{n,\alpha}^\dagger \hat{b}_{n+1,\alpha}) + Fnd\hat{n}_{n,\alpha}] + \sum_{n_a,n_b} U e^{-|n_a-n_b|/\xi} \hat{n}_{n_a} \hat{n}_{n_b}. \quad (6)$$

Just like before, $\hat{b}_{n,\alpha}$ ($\hat{b}_{n,\alpha}^\dagger$) is the bosonic annihilation (creation) operator at site n of two distinguishable particles [$\alpha \in (a, b)$], and $\hat{n} = \hat{b}_{n,\alpha}^\dagger \hat{b}_{n,\alpha}$ is the corresponding particle number operator. J denotes the single-particle tunneling amplitude between neighboring sites. U is the strength of the particle–particle interaction at a given site n when both occupy the same position. This strength decays exponentially with the distance between the particles $|n_a - n_b|$.

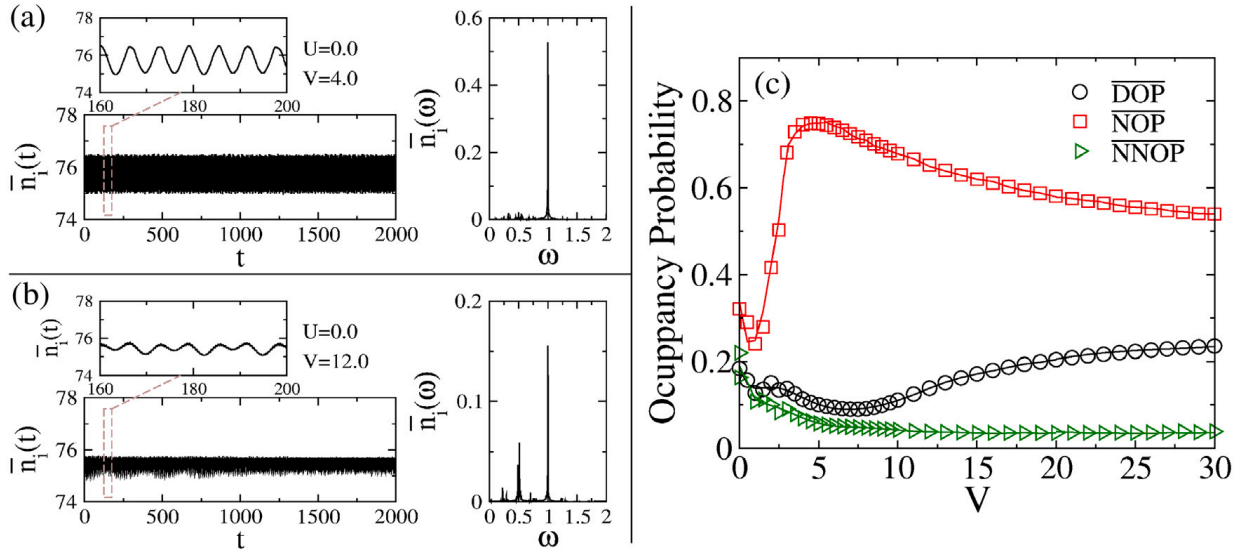


Fig. 4. (a-b) Time-evolution of wave-packet centroid and the respective Fourier transform for quantum walks in which particles present only nearest-neighbor interaction show coherent hopping of particles achieved by the nearest-neighbor bound states. (c) The time average of occupancy probability versus nearest-neighbor interaction strength V unveils that such coherent dynamics are dominated by particles occupying neighboring sites.

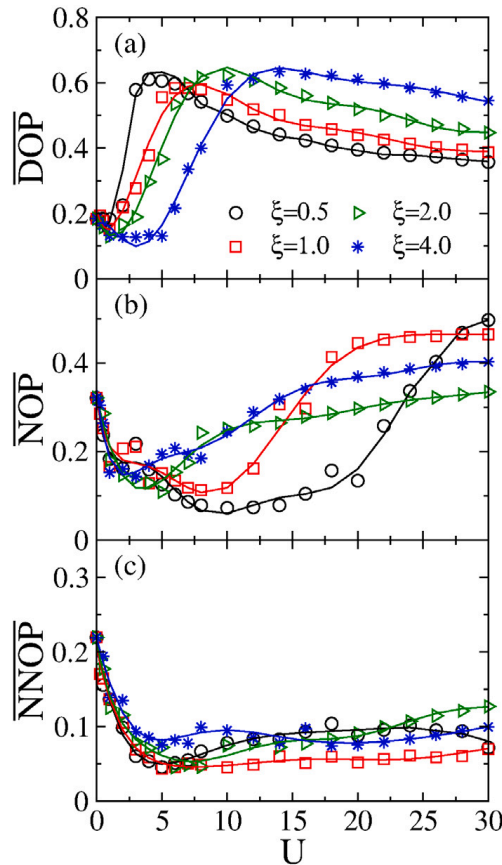


Fig. 5. The time average of (a) double occupancy probability, (b) probability of occupying neighboring sites, and (c) next-nearest-neighboring occupancy probability computed for different U strengths and interaction range ξ . The optimal U interaction strength for displaying double occupancy probability increases as ξ increases, while the ascendance of occupation probability at neighboring sites arises for smaller and smaller interactions. Such behavior signals changes in the cooperative character between the bound states as we increase the interaction strength.

Employing the identical formalism and parameter sets previously applied for the time evolution, we probe the influence of the interaction range ξ on the Bloch-oscillating dynamics of two particles. We keep the lattice size, initial wave-packet width, and F the same as Figs. 2–4 and compute the occupancy probabilities $\overline{\text{DOP}}$, $\overline{\text{NOP}}$, $\overline{\text{NNOP}}$ in the function of interaction strength U . We

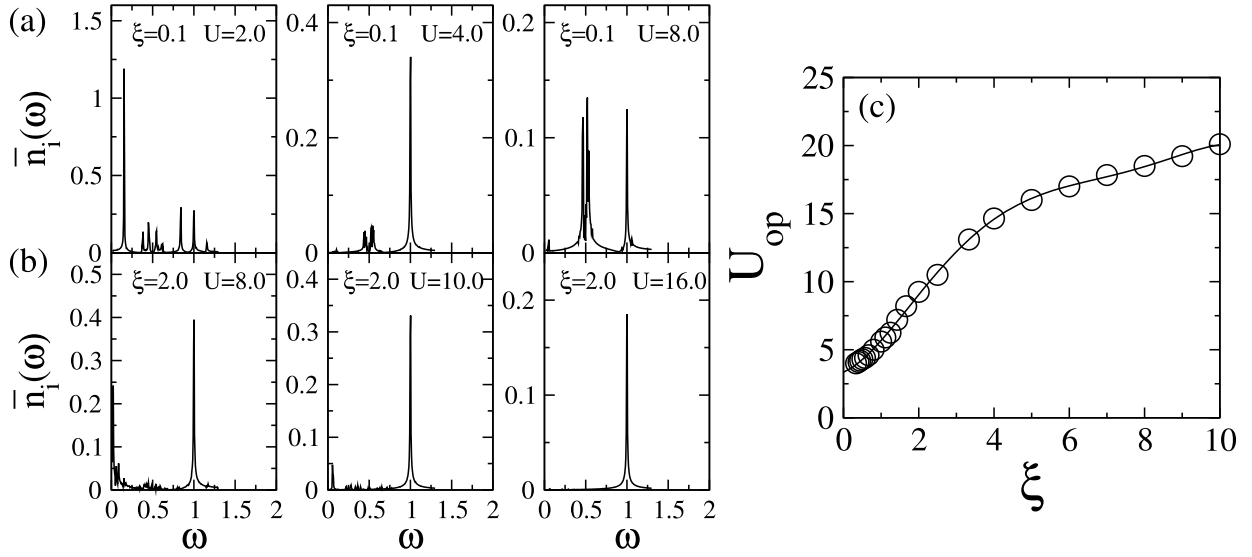


Fig. 6. (a-b) Fourier transform obtained from the time-evolution of wavepacket centroid. (a) For small ξ , competition between bound and unbound states makes the coherent hopping of particles perform better for intermediate interaction strength. (b) As ξ increases, the coherent hopping in which particles occupy neighboring sites also influences the dynamics of particles. Such a cooperative effect of bound states dominates the particle dynamics even for strong interactions. (c) Optimal interaction strength for coherent particle dynamics increases with ξ .

start by exploring the change in the interaction range $\xi = 0.5, 1.0, 2.0, 4.0$. In Fig. 5a we observe a slower decaying rate of \overline{DOP} as the interaction range increases. Furthermore, the optimal U interaction strength for displaying double occupancy probability increases as ξ increases. On the other hand, the ascendance of occupation probability at neighboring sites (\overline{NOP}) arises for smaller and smaller interaction strengths as we increase the interaction range ξ . As double occupancy and nearest-neighbor occupancy were more energetically favorable, \overline{NNOP} remains much less sensitive to interaction range ξ than the \overline{DOP} and \overline{NOP} .

Optimal coupling signals the best scenario of particles moving coherently, with the least influence of unbound states or competitive effects. Such features are studied in Fig. 6a-b, where we present the Fourier transform obtained from the time evolution of the centroid for configurations around the interaction of optimal coupling. For small enough ξ , the system behaves as if it has only on-site interaction. We observe a nonmonotonic character in the coherent hopping of the particles. The competition between bound and unbound states previously reported makes such coherent dynamics of particles perform better for intermediate interaction strength. As ξ increases, this nonmonotonic behavior is no longer observed. With the emergence of non-local bound states, the coherent hopping in which particles occupy neighboring sites also influences the dynamics of particles. Fig. 6c shows the optimal interaction strength for coherent particle hopping increasing with ξ , corroborating findings in Fig. 5. Except for very small ξ , U_{op} symbolizes the interaction strength from which coherent hopping becomes clearly predominant.

A notable behavior observed in Fig. 6 is the lack of non-coherent modes in the Fourier spectra as stronger interaction strengths are considered. Such behavior suggests a cooperative scenario consistent with the emergence of additional bound states. Indeed, long-range interaction gives rise to other bound states, as we report in Fig. 7. Here, we have applied a numerical diagonalization of the Hamiltonian (6) to an open chain with $N = 120$ sites in the absence of electric field and computed the normalized density of states (DOS) versus energy (E). Computational limitations have prevented us from reaching larger sizes. However, preliminary studies revealed no significant changes in DOS when exploring lattices with $N = 90, 100$, and 110 . We explored the increase in the U interaction strength and the ξ interaction range, considering $\xi = 0.5, 1.0, 2.0, 4.0$. For $\xi = 0.5$, we observe a sub-band emerging from the main band as the interparticle interaction U increases. This sub-band decouples around $U = 4$ and moves away from the main band as the interaction increases further. This behavior is consistent with characteristics reported in analytical [52] and numerical [25] studies for systems with solely on-site interactions, reinforcing previous findings for sufficiently small ξ values (Fig. 6). The emergence of distinct sub-bands of bound states is evident as we consider a more extended interaction range, such as $\xi = 1.0$. The first one matches with on-site bound states, while the latter is compatible with nearest-neighbor bound states. More bound states sub-bands emerge when considering an interaction range ξ even longer (see Fig. 7c-d). The third sub-band corresponds to bound states where particles occupy the next-nearest-neighbors, and so on. The emergence of these other sub-bands and the cooperative effect between the existing bound states are consistent with preserving coherent hopping for sufficiently strong interactions in Fig. 6. We observed the energy range of bound-states sub-bands varying as the interaction range ξ changes. As ξ increases, the sub-bands emerge from the main band for smaller interaction strengths, which corroborates the behavior of \overline{NOP} in Fig. 5. Results also suggest a broadening of the on-site bound states sub-band as ξ increases, thus modifying the competitive scenario between bound and unbound states. Such behavior aligns with the increase in the optimal interaction for observing coherent hopping shown in Fig. 6, as well as the behavior of \overline{DOP} in Fig. 5.

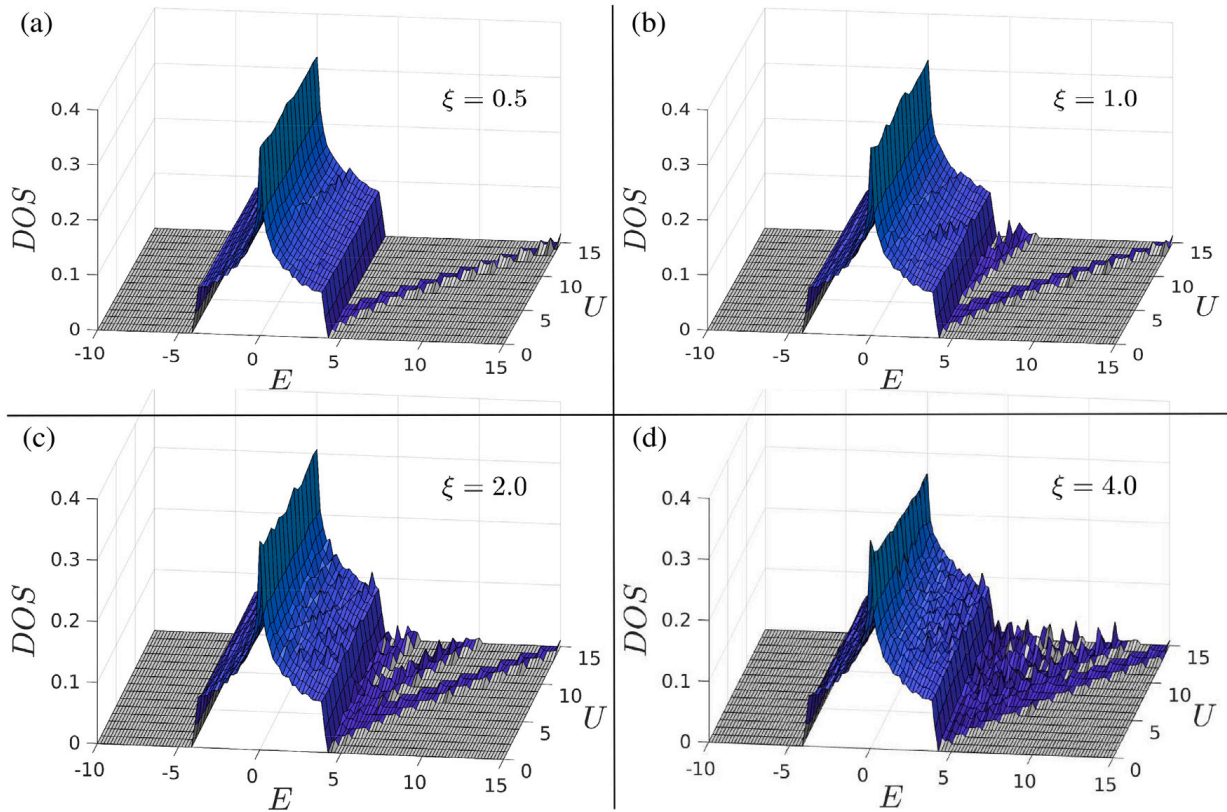


Fig. 7. The normalized density of states (DOS) versus energy (E) for distinct interaction strengths (U), by considering the interaction range (a) $\xi = 0.5$, (b) $\xi = 1.0$, (c) $\xi = 2.0$ and (d) $\xi = 4.0$. For ξ small enough, we observe the emergence of only a sub-band of bound states as U increases. This behavior is close to systems with particles exhibiting only on-site interaction. As the interaction range ξ increases, we observe the existence of other sub-bands of bound states, corroborating previous results regarding the cooperative effect of bound states.

4. Final remarks

In this work, we consider a system of interacting particles and study how the coexistence of local and non-local bound states influences particle dynamics. We explore two-particle quantum walking in tilted optical lattices, a framework with proven experimental viability and already-known dynamic signatures. We study systems with short- and long-range interactions between particles and observe the emergence of bound states directly associated with such interaction. Results show distinct correlated dynamics associated with dominant quantum states. On-site bound states from on-site interactions are responsible for correlated dynamics in which particles preferentially occupy the same site. Nearest-neighbor bound states lead to correlated dynamics in which particles preferentially occupy neighboring sites, and so on. The existing bound states are responsible for competitive and cooperative effects, which may give rise to unusual dynamics. We display the optimal scenarios for particles to perform coherent dynamics and how they change as a function of the interaction range. Thanks to the cooperative aspects between bound states, the nonmonotonic behavior exhibited by systems with only local interaction gives way to robustly correlated quantum walks, where coherent hopping is sustained even for strong interparticle interactions. As a result, our findings enhance comprehension of how available states in a quantum walk interplay with the underlying quantum correlations.

Beyond cold atoms trapped in optical lattices [22], which offer the versatility to combine multiple controls and measurements [43], photonic lattices [23,54], designed electric circuits [24], and superconducting processors [44,45] can map the dynamics of two interacting particles. This scenario positions them as promising frameworks for potential experimental investigations. To conclude, it would be interesting to have these results derived from an analytical framework, which would bring valuable new insights into the cooperative effects between bound states and quantum walks of particles hopping coherently.

CRedit authorship contribution statement

M.F.V. Oliveira: Writing – original draft, Methodology, Investigation, Data curation. **M.S. Santos Junior:** Writing – original draft, Methodology, Investigation, Data curation. **Michele B. Coêlho:** Writing – original draft, Methodology, Investigation, Data curation. **F.A.B.F. de Moura:** Writing – review & editing, Validation, Supervision, Methodology. **W.S. Dias:** Writing – review & editing, Validation, Supervision, Methodology, Investigation, Conceptualization.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Data availability

Data will be made available on request.

Acknowledgments

This work was supported by CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal do Nível Superior), Brazil, CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), Brazil, and FAPEAL (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas), Brazil.

References

- [1] R. Ionicioiu, P. Zanardi, Quantum-information processing in bosonic lattices, *Phys. Rev. A* 66 (2002) 050301.
- [2] A.M. Childs, D. Gosset, Z. Webb, Universal computation by multiparticle quantum walk, *Science* 339 (6121) (2013) 791–794.
- [3] R. Asaka, K. Sakai, R. Yahagi, Two-level quantum walkers on directed graphs. I. Universal quantum computing, *Phys. Rev. A* 107 (2023) 022415.
- [4] A. Peruzzo, M. Lobino, J.C.F. Matthews, N. Matsuda, A. Politi, K. Poullos, X.-Q. Zhou, Y. Lahini, N. Ismail, K. Wörhoff, Y. Bromberg, Y. Silberberg, M.G. Thompson, J.L. O'Brien, Quantum walks of correlated photons, *Science* 329 (5998) (2010) 1500–1503.
- [5] J.K. Gamble, M. Friesen, D. Zhou, R. Joynt, S.N. Coppersmith, Two-particle quantum walks applied to the graph isomorphism problem, *Phys. Rev. A* 81 (2010) 052313.
- [6] S.D. Berry, J.B. Wang, Two-particle quantum walks: Entanglement and graph isomorphism testing, *Phys. Rev. A* 83 (2011) 042317.
- [7] D. Li, J. Zhang, F.-Z. Guo, W. Huang, Q.-Y. Wen, H. Chen, Discrete-time interacting quantum walks and quantum Hash schemes, *Quantum Inf. Process.* 12 (3) (2013) 1501–1513.
- [8] M. Abraham, R. Berkovits, Persistent currents in an interacting 1D disordered ring: Manifestations of the Mott-Hubbard transition, *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 1509–1512.
- [9] A. Müller-Groeling, H.A. Weidenmüller, C.H. Lewenkopf, Interacting electrons in mesoscopic rings, *Europhys. Lett. (EPL)* 22 (3) (1993) 193–198.
- [10] D.L. Shepelyansky, Coherent propagation of two interacting particles in a random potential, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 2607–2610.
- [11] W. Dias, M. Lyra, Non monotonic influence of hubbard interaction on the Anderson localization of two-electron wavepackets, *Physica A* 411 (2014) 35–41.
- [12] A. Peixoto, W. Dias, M. Lyra, F. de Moura, Wavepacket dynamics of coupled particles in aperiodic chains: Weakening of Anderson localization and local field effects, *Physica A* 395 (2014) 22–30.
- [13] D. Semmler, K. Byczuk, W. Hofstetter, Mott-Hubbard and Anderson metal-insulator transitions in correlated lattice fermions with binary disorder, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 115111.
- [14] R. Vosk, E. Altman, Superfluid-insulator transition of ultracold bosons in disordered one-dimensional traps, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 024531.
- [15] Z. Ristivojevic, A. Petković, P. Le Doussal, T. Giamarchi, Phase transition of interacting disordered bosons in one dimension, *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012) 026402.
- [16] A. Habibi, E. Adibi, S.A. Jafari, Strong-coupling perturbative study of the disordered Hubbard model on the honeycomb lattice, *Phys. Rev. B* 98 (2018) 245105.
- [17] E. Adibi, A. Habibi, S.A. Jafari, Phase transitions in the binary-alloy Hubbard model: Insights from strong-coupling perturbation theory, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 014204.
- [18] R.A. Vargas-Hernández, R.V. Krems, Quantum walks assisted by particle-number fluctuations, *Phys. Rev. A* 98 (2018) 022107.
- [19] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd, A. Aspuru-Guzik, Environment-assisted quantum transport, *New J. Phys.* 11 (3) (2009) 033003.
- [20] J.P. Keating, N. Linden, J.C.F. Matthews, A. Winter, Localization and its consequences for quantum walk algorithms and quantum communication, *Phys. Rev. A* 76 (2007) 012315.
- [21] L. Sansoni, F. Sciarrino, G. Vallone, P. Mataloni, A. Crespi, R. Ramponi, R. Osellame, Two-particle bosonic-Fermionic quantum walk via integrated photonics, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 010502.
- [22] P.M. Preiss, R. Ma, M.E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, P. Zupancic, Y. Lahini, R. Islam, M. Greiner, Strongly correlated quantum walks in optical lattices, *Science* 347 (6227) (2015) 1229–1233.
- [23] G. Corrielli, A. Crespi, G. Della Valle, S. Longhi, R. Osellame, Fractional Bloch oscillations in photonic lattices, *Nature Commun.* 4 (1) (2013) 1555.
- [24] W. Zhang, H. Yuan, H. Wang, F. Di, N. Sun, X. Zheng, H. Sun, X. Zhang, Observation of Bloch oscillations dominated by effective anyonic particle statistics, *Nature Commun.* 13 (1) (2022) 2392.
- [25] W.S. Dias, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 155124.
- [26] A. Ahlbrecht, A. Alberti, D. Meschede, V.B. Scholz, A.H. Werner, R.F. Werner, Molecular binding in interacting quantum walks, *New J. Phys.* 14 (7) (2012) 073050.
- [27] A. Bisio, G.M. D'Ariano, P. Perinotti, A. Tosini, Thirring quantum cellular automaton, *Phys. Rev. A* 97 (2018) 032132.
- [28] A. Bisio, G.M. D'Ariano, N. Mosco, P. Perinotti, A. Tosini, Solutions of a two-particle interacting quantum walk, *Entropy* 20 (6) (2018).
- [29] R. Khomeriki, D.O. Krimer, M. Haque, S. Flach, Interaction-induced fractional Bloch and tunneling oscillations, *Phys. Rev. A* 81 (2010) 065601.
- [30] X. Cai, H. Yang, H.-L. Shi, C. Lee, N. Andrei, X.-W. Guan, Multiparticle quantum walks and Fisher information in one-dimensional lattices, *Phys. Rev. Lett.* 127 (2021) 100406.
- [31] M.K. Giri, S. Mondal, B.P. Das, T. Mishra, Signatures of nontrivial pairing in the quantum walk of two-component bosons, *Phys. Rev. Lett.* 129 (2022) 050601.
- [32] S. Sarkar, T. Sowiński, Correlations in few two-component quantum walkers on a tilted lattice, *Phys. Rev. A* 102 (2020) 043326.
- [33] C.H. Greene, P. Giannakeas, J. Pérez-Ríos, Universal few-body physics and cluster formation, *Rev. Modern Phys.* 89 (2017) 035006.
- [34] M. Ganahl, E. Rabal, F.H.L. Essler, H.G. Evertz, Observation of complex bound states in the spin-1/2 heisenberg XXZ chain using local quantum quenches, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 077206.

- [35] A. Morvan, T.I. Andersen, X. Mi, C. Neill, A. Petukhov, K. Kechedzhi, D.A. Abanin, A. Michailidis, R. Acharya, F. Arute, K. Arya, A. Asfaw, J. Atalaya, J.C. Bardin, J. Basso, A. Bengtsson, G. Bortoli, A. Bourassa, J. Bovaird, L. Brill, M. Broughton, B.B. Buckley, D.A. Buell, T. Burger, B. Burkett, N. Bushnell, Z. Chen, B. Chiaro, R. Collins, P. Conner, W. Courtney, A.L. Crook, B. Curtin, D.M. Debroy, A. Del Toro Barba, S. Demura, A. Dunsworth, D. Eppens, C. Erickson, L. Faoro, E. Farhi, R. Fatemi, L. Flores Burgos, E. Forati, A.G. Fowler, B. Foxen, W. Giang, C. Gidney, D. Gilboa, M. Giustina, A. Grajales Dau, J.A. Gross, S. Habegger, M.C. Hamilton, M.P. Harrigan, S.D. Harrington, M. Hoffmann, S. Hong, T. Huang, A. Huff, W.J. Huggins, S.V. Isakov, J. Iveland, E. Jeffrey, Z. Jiang, C. Jones, P. Juhas, D. Kafri, T. Khattar, M. Khezri, M. Kieferová, S. Kim, A.Y. Kitaev, P.V. Klimov, A.R. Klots, A.N. Korotkov, F. Kostritsa, J.M. Kreikebaum, D. Landhuis, P. Laptev, K.-M. Lau, L. Laws, J. Lee, K.W. Lee, B.J. Lester, A.T. Lill, W. Liu, A. Locharla, F. Malone, O. Martin, J.R. McClean, M. McEwen, B. Meurer Costa, K.C. Miao, M. Mohseni, S. Montazeri, E. Mount, W. Mruczkiewicz, O. Naaman, M. Neeley, A. Nersisyan, M. Newman, A. Nguyen, M. Nguyen, M.Y. Niu, T.E. O'Brien, R. Olenewa, A. Opremcak, R. Potter, C. Quintana, N.C. Rubin, N. Saei, D. Sank, K. Sankaragomathi, K.J. Satzinger, H.F. Schurkus, C. Schuster, M.J. Shearn, A. Shorter, V. Shvarts, J. Skrzny, W.C. Smith, D. Strain, G. Sterling, Y. Su, M. Szalay, A. Torres, G. Vidal, B. Villalonga, C. Vollgraft-Heidweiller, T. White, C. Xing, Z. Yao, P. Yeh, J. Yoo, A. Zalcman, Y. Zhang, N. Zhu, H. Neven, D. Bacon, J. Hilton, E. Lucero, R. Babbush, S. Boixo, A. Megrant, J. Kelly, Y. Chen, V. Smelyanskiy, I. Aleiner, L.B. Ioffe, P. Roushan, Formation of robust bound states of interacting microwave photons, *Nature* 612 (7939) (2022) 240–245.
- [36] S.-J. Gu, S.-S. Deng, Y.-Q. Li, H.-Q. Lin, Entanglement and quantum phase transition in the extended hubbard model, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 086402.
- [37] J. Kempe, Quantum random walks: An introductory overview, *Contemp. Phys.* 44 (4) (2003) 307–327.
- [38] O. Mülken, A. Blumen, Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks, *Phys. Rep.* 502 (2) (2011) 37–87.
- [39] S.E. Venegas-Andraca, Quantum walks: a comprehensive review, *Quantum Inf. Process.* 11 (5) (2012) 1015–1106.
- [40] M. Gong, S. Wang, C. Zha, M.-C. Chen, H.-L. Huang, Y. Wu, Q. Zhu, Y. Zhao, S. Li, S. Guo, H. Qian, Y. Ye, F. Chen, C. Ying, J. Yu, D. Fan, D. Wu, H. Su, H. Deng, H. Rong, K. Zhang, S. Cao, J. Lin, Y. Xu, L. Sun, C. Guo, N. Li, F. Liang, V.M. Bastidas, K. Nemoto, W.J. Munro, Y.-H. Huo, C.-Y. Lu, C.-Z. Peng, X. Zhu, J.-W. Pan, Quantum walks on a programmable two-dimensional 62-qubit superconducting processor, *Science* 372 (6545) (2021) 948–952.
- [41] Y. Aharonov, L. Davidovich, N. Zagury, Quantum random walks, *Phys. Rev. A* 48 (1993) 1687–1690.
- [42] E. Farhi, S. Gutmann, Quantum computation and decision trees, *Phys. Rev. A* 58 (1998) 915–928.
- [43] F. Schäfer, T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu, Y. Takahashi, Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices, *Nat. Rev. Phys.* 2 (8) (2020) 411–425.
- [44] Z. Yan, Y.-R. Zhang, M. Gong, Y. Wu, Y. Zheng, S. Li, C. Wang, F. Liang, J. Lin, Y. Xu, C. Guo, L. Sun, C.-Z. Peng, K. Xia, H. Deng, H. Rong, J.Q. You, F. Nori, H. Fan, X. Zhu, J.-W. Pan, Strongly correlated quantum walks with a 12-qubit superconducting processor, *Science* 364 (6442) (2019) 753–756.
- [45] Y. Ye, Z.-Y. Ge, Y. Wu, S. Wang, M. Gong, Y.-R. Zhang, Q. Zhu, R. Yang, S. Li, F. Liang, J. Lin, Y. Xu, C. Guo, L. Sun, C. Cheng, N. Ma, Z.Y. Meng, H. Deng, H. Rong, C.-Y. Lu, C.-Z. Peng, H. Fan, X. Zhu, J.-W. Pan, Propagation and localization of collective excitations on a 24-qubit superconducting processor, *Phys. Rev. Lett.* 123 (2019) 050502.
- [46] R. Morandotti, U. Peschel, J.S. Aitchison, H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, Experimental observation of linear and nonlinear optical Bloch oscillations, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999) 4756–4759.
- [47] F. Domínguez-Adame, Beyond the semiclassical description of Bloch oscillations, *Eur. J. Phys.* 31 (3) (2010) 639.
- [48] D. Bohm, D. Pines, A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas, *Phys. Rev.* 92 (1953) 609–625.
- [49] F. Bloch, Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, *Z. Phys.* 52 (7) (1929) 555–600.
- [50] D.H. Dunlap, V.M. Kenkre, Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 3625–3633.
- [51] A. Peixoto, W. Dias, The role of on-site and nearest-neighbor interactions in the correlated two-particles quantum walk, *Solid State Commun.* 242 (2016) 68–73.
- [52] J. Hubbard, B.H. Flowers, Electron correlations in narrow energy bands, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A* 276 (1365) (1963) 238–257.
- [53] H. Sun, B. Yang, H.-Y. Wang, Z.-Y. Zhou, G.-X. Su, H.-N. Dai, Z.-S. Yuan, J.-W. Pan, Realization of a bosonic antiferromagnet, *Nat. Phys.* 17 (9) (2021) 990–994.
- [54] S. Longhi, Photonic Bloch oscillations of correlated particles, *Opt. Lett.* 36 (16) (2011) 3248–3250.

ANEXO B . Artigo: Propriedades do par elétron-rede em cadeias com interação cúbica.

Electron–lattice pair properties in chains with cubic interaction

M. S. S. Junior*, M. O. Sales[†] and F. A. B. F. de Moura^{*,‡}

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

*†IFMA Campus São João dos Patos,
Rua Padre Santiago, s/n, Centro, São João dos Patos,
Maranhão 65665-000, Brazil*

‡fidelis@fis.ufal.br

Received 5 July 2022

Accepted 31 March 2023

Published 6 May 2023

In this paper, we investigate the one-electron propagation in a nonlinear chain with electron–lattice interaction. The model contains standard cubic nonlinear terms, and we introduce the coupling between the electron and the lattice through the hopping distribution. We solve the coupled equation set to electron and lattice and calculate the electronic position as a function of time. We provide a detailed investigation of the electron and lattice dynamics for a wide range of electron–lattice coupling intensities. Our results demonstrate that depending on the initial condition we consider and the intensity of the electron–lattice interaction, we can obtain (or not) an electron–phonon pair formation. Our results reveal that, depending on the initial velocity of the lattice and the degree of electron–lattice term, we can observe a repulsion between electron and lattice deformations.

Keywords: Localization; electron–lattice; nonlinear.

1. Introduction

The electronic-phonon phenomenology attracted a great attention in the last years.^{1–34} Within the context of one electron in a one-dimensional tight-binding Hamiltonian, one of the most relevant contributions was the Su, Schrieffer and Heeger (SSH) model.⁸ Within the SSH framework, off-diagonal terms are directed dependents on the lattice vibrations. By using an atom-optics setup, an experimental quantum simulation of this model was provided.⁹

Other interesting works were done by Davydov.^{35–39} The Davydov formalism describes the interaction of exciton modes related to the amide-I excitation with

[‡]Corresponding author.

the lattice phonons. It was pointed out that the possibility of the electron–lattice coupling provides electronic propagation. Within the context of nonlinear lattices, a wide collection of works had been showed in the past.^{31,40–54} Velarde pointed out the possibility of electronic transport mediated by solectrons (a “quasi-particle” originated from the coupling between self-trapped states and nonlinear solitons). Based on this theory, the electronic transport mediated by this electron–soliton phenomenology has been investigated in several two-dimensional anharmonic lattices, particularly in a square lattice similar to the “cuprate” lattice.⁵⁰

In Ref. 55, an experimental study of tunneling dynamics was carried out on a sub-nanosecond time scale. Surface acoustic waves (SAWs) were used to generate dynamic quantum dots in a one-dimensional channel, in which these dots transport one electron each at SAW velocity. In Ref. 56, the time evolution of a single electron wave function was studied using moving quantum dots defined by SAW. As the bandwidth limits the coherent dynamics of the system, a procedure was proposed to overcome this. Quantum dots travel through a static potential and different confinement regions, causing electrons to be excited in a superposition of state. It was investigated experimentally by electron transport correlated with the aid of a SAW in almost one-dimensional channels.⁵⁷ These electrons were transported through three micron-separated channels formed in a heterostructure. The SAW traps electrons and leads them into two depleted channels connected to an open ballistic channel. In Ref. 58, it was demonstrated experimentally using a source and detector of a single electron propagating in isolation from the other electrons in a one-dimensional channel. This channel was placed between two quantum dots, and a SAW transported this electron through the channel with a velocity $3 \mu\text{m ns}^{-1}$. The emission and reception efficiencies are 96% and 92%, respectively. In Ref. 59, the authors move a single electron along a channel using a SAW. In Ref. 60, the authors perform an exciting experiment in graphene under a SAWs effect on a piezoelectric surface. They demonstrate the existence of an acoustoelectric current crossing the graphene structure. In Ref. 61, it was experimentally demonstrated that in semiconductor heterostructures such as GaAs/AlGaAs, the electronic propagation between distant quantum dots can be obtained using SAW. They obtain a single-shot transfer with an efficiency of 99%. In Ref. 62, an experimental study was carried out for the generation of single photons, without using quantum dots. They transported a single electron at a minimum potential of a SAW to a region of holes to form an exciton. In Ref. 63, the dynamics of electrons between two coupled wires under the effect of SAW was investigated in detail. They prove that coherent tunneling occurs when the electrostatic potential generated by the SAW is specially aligned between the two coupled wires. In Ref. 64, an experimental analysis of a SAW waveguide in lithium niobate (LiNbO_3) was carried out from a line defect within a triangular photonic lattice. The SAW mode involves extensive bandwidth and demonstrates isolation in the lateral direction in such a waveguide.

In this work, we describe the electron–lattice pair formation in models with cubic nonlinearity. The problem of a one electron moving in a Fermi–Pasta–Ulam

chain was investigated in the past⁵³ however, a more detailed description of the possibility of electron–soliton propagation was not done. Here we investigate the occurrence of the electron–lattice pair and its dependence on the initial condition and the electron–phonon interaction. Our results demonstrate the optimal condition to obtain the electronic dynamics controlled by the solitonic propagation. We also investigate the amount of the wave function that the lattice deformation can capture and its dependence on the initial condition and electron–lattice coupling. Our calculations indicate that the occurrence of electron–soliton pairs is a rare phenomenon. The electron wave function and the lattice’s deformation remain separated even for intense electron–lattice interaction.

2. Model

We investigate the propagation of a one electron in a chain with N masses. We can write the electronic tight-binding Hamiltonian as follows:

$$H_e = \sum_j V_{j,j+1} (c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}), \quad (1)$$

where the operators c_j^\dagger and c_j are the creation and annihilation operators for the electron at site j . $V_{j,j+1}$ represents the electron’s kinetic energy (the hopping term) that depends on the distance between two consecutive masses. In our model, we have $V_{j,j+1} = -[1 - \alpha(Q_{j+1} - Q_j)]$.⁸ The quantity Q_j represents the displacement of the mass at site (j) from its equilibrium position. α is a tunable parameter that determines the electron–lattice coupling strength. The lattice dynamics will be obtained by considering that the chain is a Fermi–Pasta–Ulam chain with N masses with classical Hamiltonian given by⁵³

$$H_L = \sum_j \left\{ \frac{P_j^2}{2} + \frac{1}{4} [(Q_{j+1} - Q_j)^2 + (Q_j - Q_{j-1})^2] \right\} + \sum_j \left\{ \frac{1}{6} [(Q_{j+1} - Q_j)^3 + (Q_j - Q_{j-1})^3] \right\}. \quad (2)$$

We emphasize that all masses are equal to unit ($m_j = 1$). P_j represents the momentum the j th mass. The lattice equation can be written as $-\frac{\partial H}{\partial Q_j} = a_j(t)$ where

$$a_j(t) = (Q_{j+1} - Q_j) - (Q_j - Q_{j-1}) + [(Q_{j+1} - Q_j)^2 - (Q_j - Q_{j-1})^2] - \alpha \{ (c_{j+1}^* c_j + c_{j+1} c_j^*) - (c_j^* c_{j-1} + c_j c_{j-1}^*) \}. \quad (3)$$

The time-dependent wave function $|\Phi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)|j\rangle$ will be obtained by numerical solution of the time-dependent Schrödinger. We consider the electron initially localized at site $N/2$, i.e. $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_j c_j(t=0)|j\rangle$ where $c_j(t=0) = \delta_{j,N/2}$. The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent

Schrödinger equation as ($\hbar = 1$)

$$i \frac{dc_j(t)}{dt} = -[1 - \alpha(Q_{j+1} - Q_j)]c_{j+1}(t) - [1 - \alpha(Q_j - Q_{j-1})]c_{j-1}(t). \quad (4)$$

The classical equation was solved by using a standard Verlet velocity formalism.⁶⁵ The position at time Δt is given by $Q_j(t = \Delta t) \approx Q_j(t = 0) + P_j(t = 0)(\Delta t) + [(\Delta t)^2/2]a_j(t = 0)$. The momentum at time Δt is given by $P_j(t = \Delta t) \approx P_j(t = 0) + (\Delta t/2)(a_j(t = 0) + a_j(t = \Delta t))$. We emphasize that for initial times, the lattice position and velocity were considered such as $Q_j(t = 0) = 0$ and $P_j = v_0\delta_{j,N/2}$. In this kind of initial condition, i.e. an initial impulse excitation, we can excite the nonlinear solitonic modes that this cubic model can exhibit.⁵³ The electron dynamics equations (Eq. (4)) were solved numerically by using a high-order method based on the Taylor expansion⁶⁶ of the evolution operator $U(\Delta t) = \exp(-iH_e\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} \frac{(-iH_e\Delta t)^l}{l!}$ where H_e is the one-electron Hamiltonian. The wave function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\Phi(t = 0)\rangle$. This combined method (Verlet + Taylor) can be used recursively to obtain the displacement, momentum and the wave function at time t . The following results were taken by using $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$ and $n_o = 10$. Our analysis will be done by following the electron and the lattice deformation propagation along the chain. The electronic propagation can be analyzed by using the quantity n_e defined as follows:

$$n_e = \sum_j (j - N/2) |c_j(t)|^2. \quad (5)$$

We compute the electronic velocity (V_e) by using a linear fitting of the curve $n_e \times t$. The lattice deformation will be analyzed using an effective probability of deformations Π_j defined as follows:

$$\Pi_j = A_j / \sum_j A_j, \quad (6)$$

where $A_j = (1 - e^{-(Q_j - Q_{j-1})})^2$. The centroid of the deformation wave's (n_L) can be obtained as follows:

$$n_L = \sum_j (j - N/2) \Pi_j. \quad (7)$$

We obtain the propagation velocity of the lattice deformations (V_L) following a similar way as was used for finding V_e (i.e. a linear fitting of the curve $n_L \times t$).

3. Results

We show our results about the electron–lattice dynamics within this cubic nonlinear model. We emphasize that we solve the model considering a chain with $N = 10^5$ sites. However, we have used the self-expanded trick to speed up the calculation. Therefore, we start our calculations in a small fraction of the chain around the center of chain (with size $N_0 = 200$). Whenever the electron wave function (or

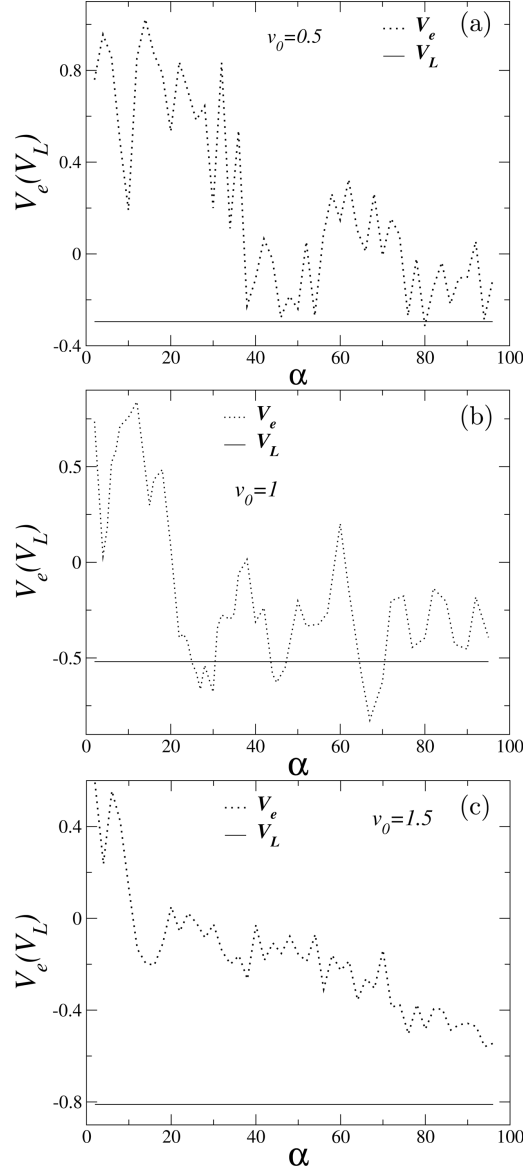


Fig. 1. Velocity of the electron (V_e) and the lattice (V_L) vs the electron–lattice coupling. The initial lattice velocity was $v_0 = -0.5$ upto -1.5 .

the lattice vibrations) arrives at the boundary of this segment, we increase the value of N_0 . We stress that we consider the electron initially localized at site $N/2$, i.e. $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_j c_j(t=0)|j\rangle$ where $c_j(t=0) = \delta_{j,N/2}$. The initial condition considered for the lattice was $Q_j(t=0) = 0$ and $P_j = v_0\delta_{j,N/2}$. In Fig. 1, we plot the velocity of the electron and the lattice vs the electron–lattice coupling. We calculate V_e and V_L following the same procedure: we calculate curves of n_e vs t (and n_L vs t); using these curves, we applied a linear fitting to calculate V_e and V_L , respectively. We emphasize that the curves of n_e and n_L were considered from $t = 0$ upto t_m (with $t_m > 10^4$ time units). The initial lattice velocity was $v_0 = 0.5$ upto 1.5 . By analyzing these results, we can see that the lattice deformation kept its velocity roughly independent of the electron–lattice interaction. Moreover, we observe that the magnitude of the lattice’s velocity exhibits some dependence on the initial velocity.⁵⁴ This phenomenology is directly dependent of the kind of

nonlinearity we have considered in our model.⁵⁴ Chains with cubic nonlinearity that were started with initial impulse excitation promote the appearance of a nonlinear stable solitonic mode.⁵³ This soliton mode travels along the chain with velocity roughly constant (independent of the electron–lattice coupling). Therefore, the solid line obtained in our calculations indicates precisely this solitonic mode’s presence. On another side, the dotted line indicates the electronic velocity and its dependence on the electron–lattice interaction. We can see that the electronic dynamics strongly depend on the value of α and the initial lattice velocity. We can see that the electron and the lattice dynamics exhibit distinct velocities for a wide range of values of α and v_0 . We observe that a good concordance between V_e and V_L was obtained only for $v_0 = 1$ and some values of α (for α about [24–30], [45–50] and [65–70]). In general, for a wide range of values of α , our calculations indicate that the electron and the lattice solitonic mode travel with distinct velocities. In Fig. 2, we plot the

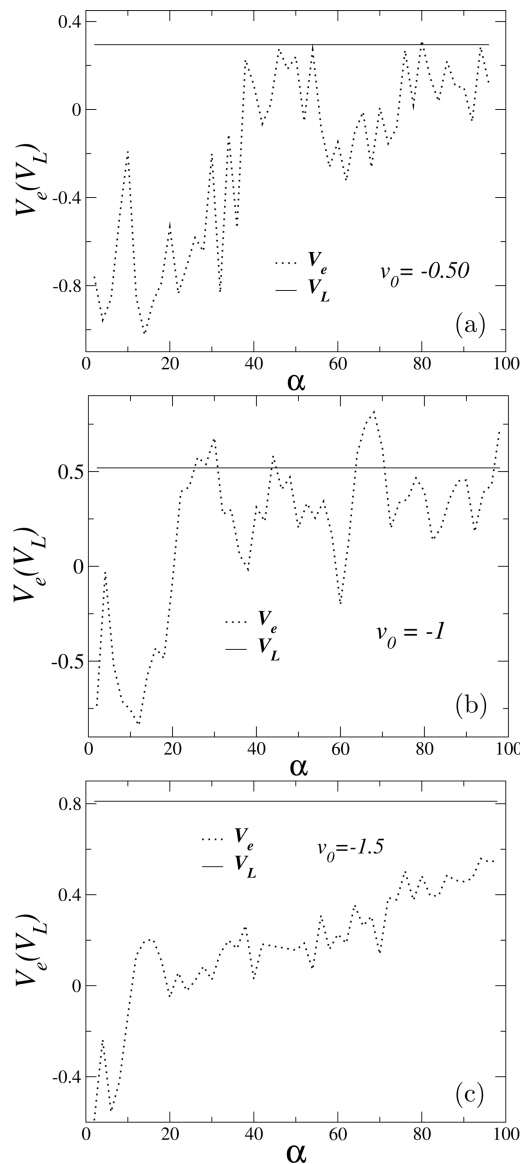


Fig. 2. Velocity of the electron (V_e) and the lattice (V_L) vs the electron–lattice coupling. The initial lattice velocity was $v_0 = -0.5$ upto -1.5 .

same results as in Fig. 1 considering the initial lattice velocity with same values as in Fig. 1 however with opposite signal. The results in Fig. 2 are qualitatively similar to those shown in Fig. 1. For a wide range of values of α , we can see that the electron wave function and the lattice’s vibrations remain roughly separated. For some specific ranges of α , we observe that V_e and V_L have relative values (thus suggesting that both excitations are close). We also observe in Fig. 2 that the signal of velocities V_e and V_L is inverted in comparison with those results in Fig. 1. It is a direct consequence of the initial velocity v_0 we consider.⁵⁴ The solitonic excitation’s velocity depends on the initial impulse’s magnitude and signal.

In Figs. 3 and 4, we show the normalized distance between the electron and the lattice’s deformation $D_{e,L}/D_m$. We emphasize that $D_{e,L} = |n_e(t) - n_L(t)|_{t \approx t_m}$ (with $t_m > 10^4$ time units). The quantity D_m represents the maximum value of $D_{e,L}$. In good agreement with the previous results shown in Figs. 1 and 2, the electron and the lattice’s deformations remain separated for a wide range of values of α . For regions where V_e and V_L are close, we obtain a small (almost zero) normalized distance $D_{e,L}/D_m$. We also observe that, qualitatively, these results are roughly the same, independent of the signal and magnitude of the initial velocity v_0 . Our

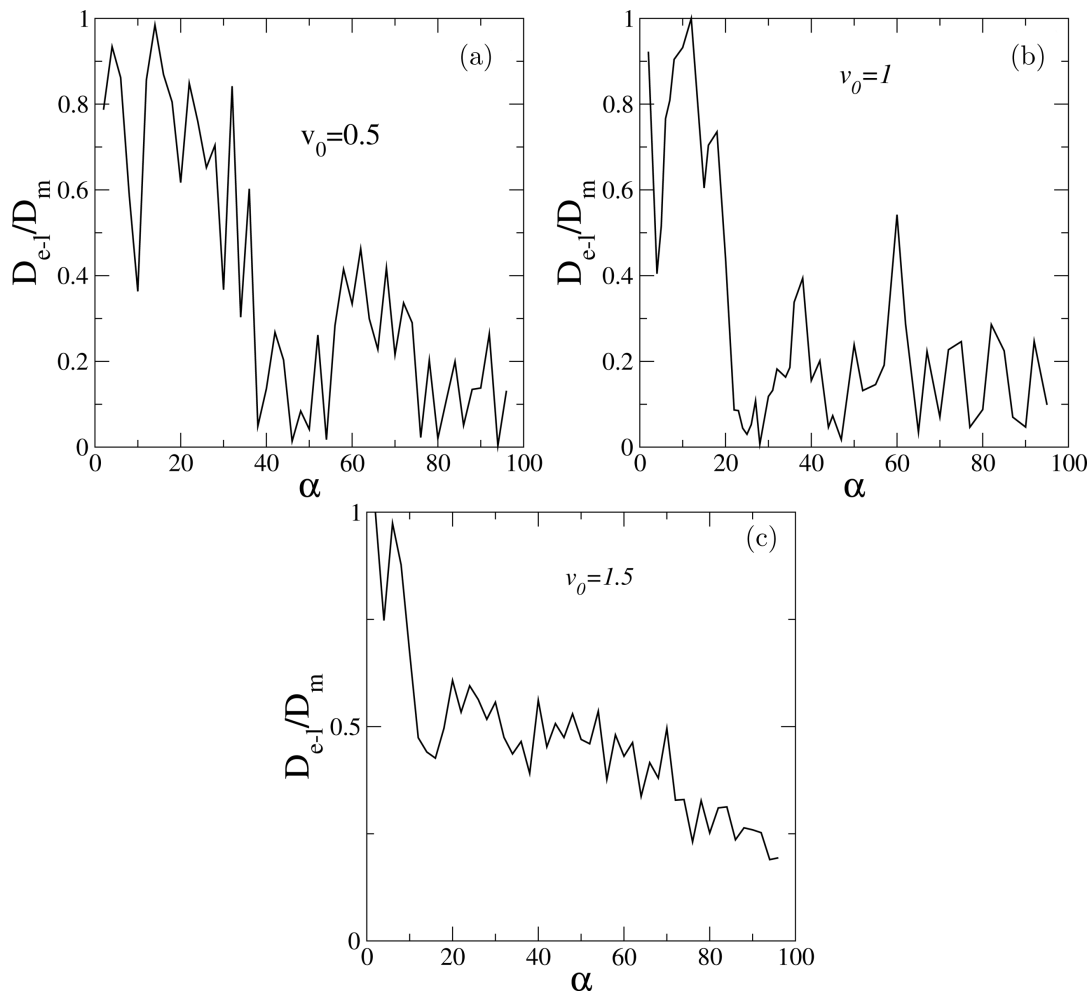


Fig. 3. Normalized distance between the electron and the lattice’s deformation vs the electron–lattice interaction. The initial lattice velocity was $v_0 = 0.5$ upto 1.5.

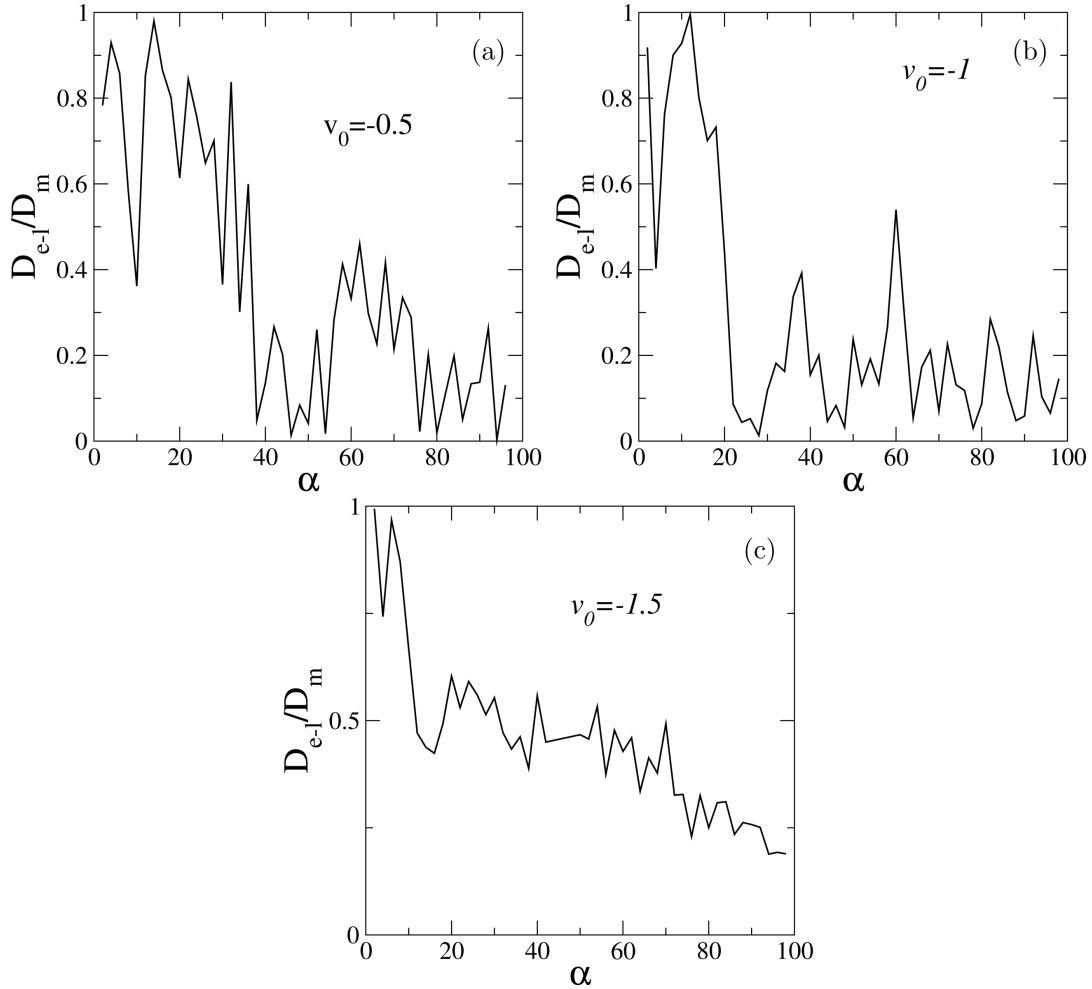


Fig. 4. Normalized distance between the electron and the lattice’s deformation vs the electron–lattice interaction. The initial lattice velocity was $v_0 = -0.5$ upto -1.5 .

calculations in these four previous pictures indeed suggest that the electron–lattice pair can exist only for some specific small intervals. For the most values of α , our results suggest that the electron wave function and the lattice deformation are kept separate. In Fig. 5, we show some details about the hopping distribution along the time and space for $\alpha = 5$ and $\alpha = 25$ (we considered $v_0 = 1$). We emphasize that in both cases ($\alpha = 5$ and 25) there is a solitonic mode with velocity roughly constant independent of α . For small α , the hopping distribution is about -1 in most parts of the chain, and, in a tiny region of the lattice, the hopping intensity shows a little growth. For $\alpha = 25$, we can observe again (see Fig. 5) a hopping profile in the plane t, n similar to that obtained for $\alpha = 5$. The difference now is the magnitude of the hopping peak (almost 10 times larger than the case with $\alpha = 5$). It is a direct consequence of the magnitude of the electron–lattice coupling. This region in which the hopping increases is exactly the position of solitonic deformation. Therefore, the solitonic deformation promotes the appearance of this hopping profile. This kind of “hopping wave” promotes the trapping of a finite fraction of the wave function. However, the amount of the wave function trapped by the “hopping profile” depends on the value of α and also v_0 . In Fig. 6, we can see the fraction of the wave

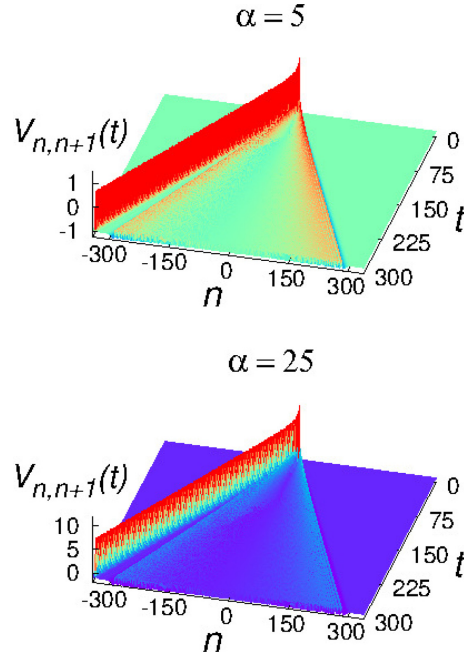


Fig. 5. The hopping parameter $V_{j,j+1}$ vs t and n for $\alpha = 5$ and $\alpha = 25$ (we considered $v_0 = 1$). We emphasize that the position $n = j - N/2 = 0$ here represents the center of chain.

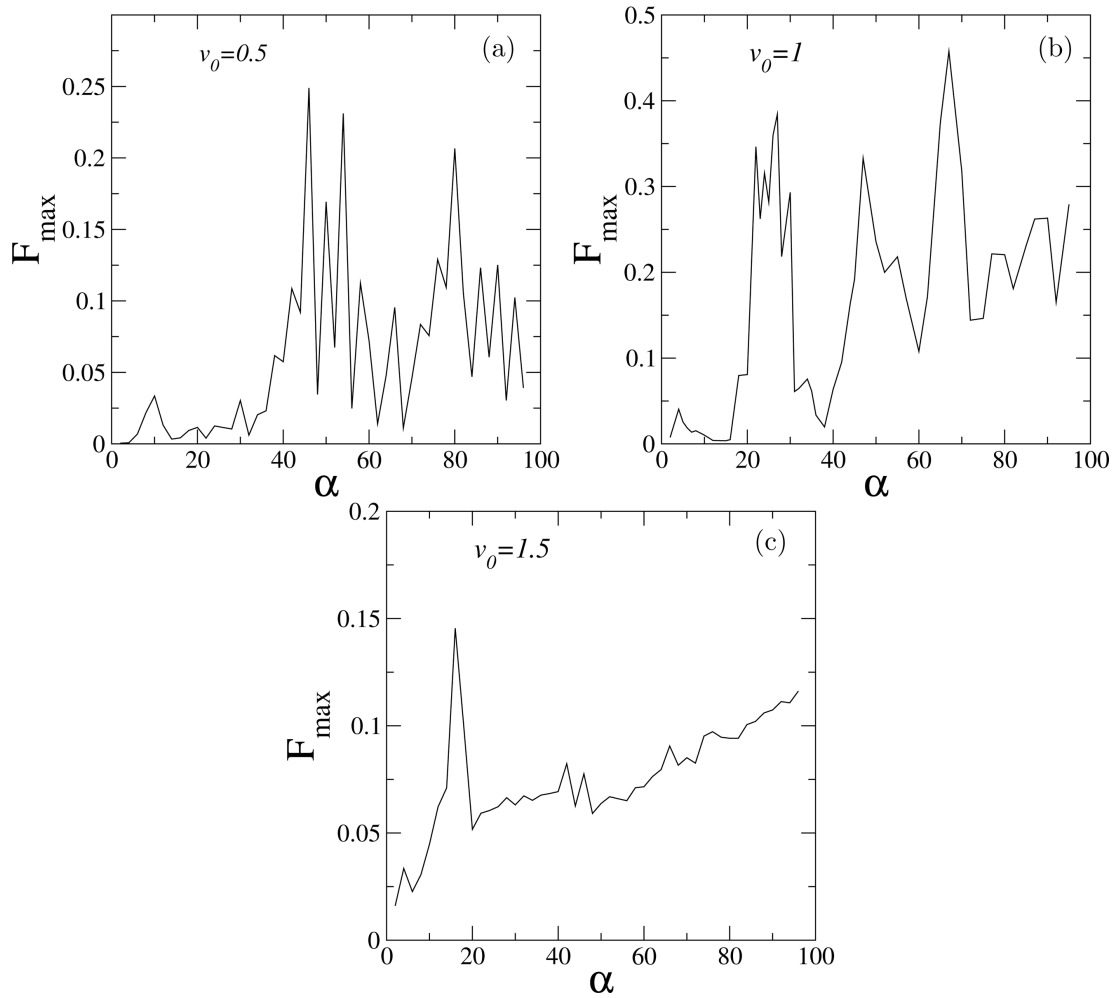


Fig. 6. The fraction of the wave function ($F_{\max} = [|c_j(t \approx t_m)|^2]_{\max}$) trapped by the solitonic lattice's deformation vs the electron–lattice interaction.

function ($F_{\max} = [|c_j(t \approx t_m)|^2]_{\max}$) vs the electron–lattice coupling α . We can see, for example, that, for $v_0 = 1$, the value of $F_{\max}(\alpha = 5)$ is much smaller than $F_{\max}(\alpha = 25)$. If you compare the figures of F_{\max} for $v_0 = 0.5$ upto 1.5 we can see that the case with $v_0 = 1$ is the largest. For example, for $v_0 = 1$ and α within [24–30], we can see that the hopping profile can capture about 40% of the wave function. It is the key ingredient behind the results shown in Figs. 1 and 3. We emphasize that, for these parameters, we have obtained $V_e \approx V_L$ and the normalized distance $D_{e,L}/D_m$ almost zero. By another side, for $v_0 = 1$ and $\alpha \approx 10$ our calculations in Figs. 1 and 3 indicate that V_e and V_L are completely distinct and the normalized distance it was maximum. These results suggest a repulsion between the electron and the lattice’s deformation. By analyzing the calculations for F_{\max} for this case, we can see that the lattice’s deformation was unable to trap a fraction of the wave function (i.e. $F_{\max}(\alpha = 10, v_0 = 1) \approx 0$). Therefore, based on Figs. 5 and 6, we can conclude that for $\alpha < 20$ the hopping distribution within the chain is, in general, unable to capture a dominant fraction of the electronic wave function. For $\alpha > 20$, depending on the value of v_0 , it is possible to promote the electron–lattice pair formation. In general, for those intervals in which that $V_e \approx V_L$ and $D_{e,L}/D_m \rightarrow 0$, the fraction F_{\max} of the electronic wave function captured by the lattice’s deformation was pretty big. Our calculations reveal that when $V_e \approx V_L$ and $D_{e,L}/D_m \rightarrow 0$, the lattice’s deformation trapped at least 30% of the initial wave-packet. Depending on the value of v_0 and α , about 50% of the electronic state was kept around the solitonic pulse.

Before concluding our work, we briefly discuss our calculations’ dependence on the initial electronic condition. We will analyze the electron–soliton dynamics considering another initial one-electron state as, for example, $|\Phi(t = 0)\rangle = \sum_j c_j(t = 0)|j\rangle$ where $c_j(t = 0) = \delta_{j, N/2-50}$. Therefore, at the same instant ($t = 0$) the classical lattice is excited using $Q_j(t = 0) = 0$ and $P_j = \delta_{j, N/2}$ and the electron is fully localized 50 sites distant from the center of the chain. Therefore, the electron will spread freely around the initial position for initial times while the solitonic mode propagates to the left side. To illustrate the electronic dynamics, we plot in Figs. 7(a) and 7(b), $|c_n|^2$ vs t and $n = j - N/2$. We emphasize that the position $n = j - N/2 = 0$ represents the center of the chain. In the absence of electron–soliton interaction ($\alpha = 0$), the electron wave packet will spread ballistically until the chain boundary (see Fig. 7(a)). In the presence of electron–soliton coupling ($\alpha = 1$), the electron initially spreads within the chain; however, after the solitonic mode meets the electron, the wave packet is swept away to the left side (see Fig. 7(b)). In Fig. 7(c), we can see the effect of the electron–soliton meeting on the electronic position along the time. For initial times, the electron centroid remains fixed at about -50 (the $n_e = 0$ represents the center of the chain; therefore, $n_e = -50$ is precisely the position we have initially localized the electron). For $t \approx 25$, the solitonic mode meets the electron and drags it to the left (see Fig. 7(c)). We can observe that, for $\alpha = 1$, the velocity of the lattice deformation and the electronic wave packet is roughly the same. We also observe in Fig. 7(d) that for $\alpha = 1$

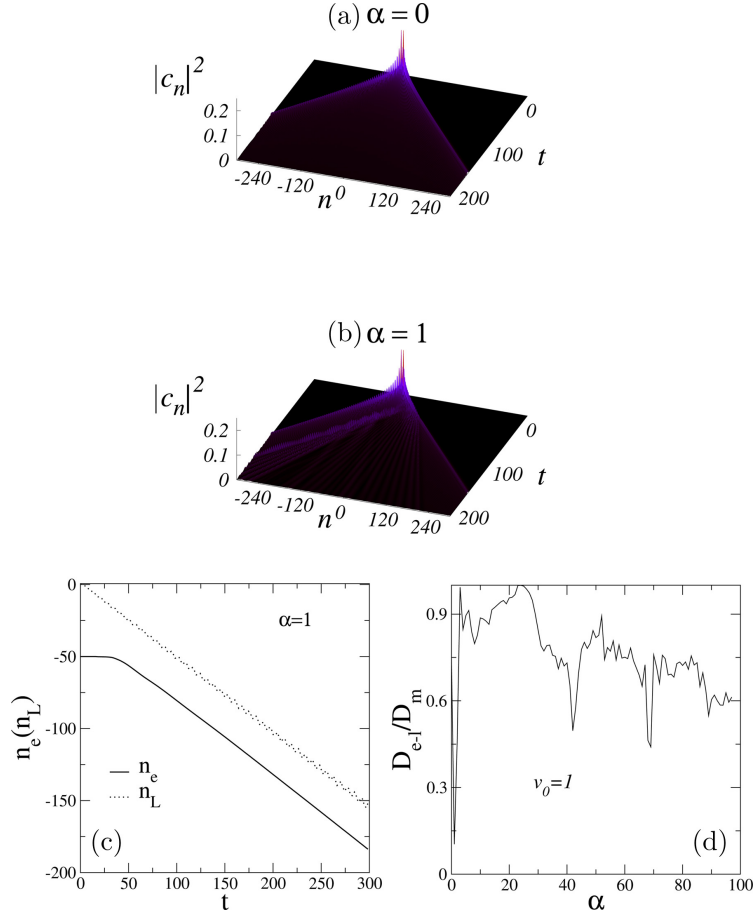


Fig. 7. Electron–soliton dynamics considering the initial one-electron state as $|\Phi(t = 0)\rangle = \sum_j c_j(t = 0)|j\rangle$ where $c_j(t = 0) = \delta_{j, N/2-50}$. The classical lattice is excited using $Q_j(t = 0) = 0$ and $P_j = \delta_{j, N/2}$. (a) $|c_n|^2$ vs t and $n = j - N/2$ for $\alpha = 0$. The electron wave packet will spread ballistically until the chain boundary. (b) The same in (a) for $\alpha = 1$; The electron initially spreads around the initial position; for time $t \approx 25$, the solitonic mode meets the electron, and most part of the electronic wave packet is pushed to the left side. (c) The electron and the lattice position vs time for $\alpha = 1$. (d) Normalized distance between the electron and the lattice’s deformation vs the electron–lattice interaction.

the normalized distance between soliton and electron is small, thus suggesting the existence of an electron–soliton pair. Therefore, for this new initial condition, our results are qualitatively similar. Whenever the solitonic excitation meets a wide (or broad) electronic wave packet, it is still possible to establish an electron–solitonic excitation and effectively control the electron propagation.

4. Summary and Final Statement

We investigate the problem of electronic dynamics in a chain with cubic nonlinearity. We solved the Schrödinger equation by using a Taylor procedure. We used Verlet velocity formalism to solve the lattice’s dynamics. Using this numerical formalism, we describe the electron–lattice pair formation and its particularities in detail. Here we investigate the possibility of the electron–lattice pair and its dependence on the initial lattice’s velocity and the electron–lattice coupling. Our results indicate the necessary condition to promote the electron–soliton dynamics. We discuss the

fraction of the electronic wave function captured by the lattice's deformations. We investigate the electronic hopping vs time and chain position. We have shown that for strong electron–lattice interaction, the hopping profile exhibits an intense peak that facilitates the electron controls. Our results demonstrate that the electron–soliton pairs occur for some specific values of α and v_0 . Therefore, our calculations indicate that the phenomenology of electron–soliton propagation is a rare effect. To obtain a cooperative dynamics profile evolving the electron and solitonic pulse close with the same velocity, we need to adjust v_0 and α within specific small intervals. We hope our work stimulates further investigation of electron–soliton dynamics in solid-state systems.

Acknowledgments

This work is supported by CNPq, CAPES and FINEP (Federal Brazilian Agencies) and FAPEAL (Alagoas State Agency).

References

1. G. Xing, Y. Miura and T. Tadano, *Phys. Rev. B* **105**, 104427 (2022).
2. P. Kurzhals *et al.*, *Nat. Commun.* **13**, 228 (2022).
3. R. P. Chatelain, V. R. Morrison, B. L. M. Klarenaar and B. J. Siwick, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 235502 (2014).
4. T. Konstantinova *et al.*, *Sci. Adv.* **4**, eaap7427 (2018).
5. D. Zahn, H. Seiler, Y. W. Windsor and R. Ernstorfer, *Struct. Dyn.* **8**, 064301 (2021).
6. A. P. Chetverikov, W. Ebeling, E. del Rio, K. S. Sergeev and M. G. Velarde, *Chaos Solitons Fractals* **150**, 111179 (2021).
7. I. A. Shepelev, S. V. Dmitriev, A. A. Kudreyko, M. G. Velarde and E. A. Korznikova, *Chaos Solitons Fractals* **140**, 110217 (2020).
8. W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979); *Phys. Rev. B* **22**, 2099 (1980); A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer and W.-P. Su, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 781 (1988).
9. E. Meier, F. An and B. Gadway, *Nat. Commun.* **7**, 13986 (2016).
10. C. Skokos, D. O. Krimer, S. Komineas and S. Flach, *Phys. Rev. E* **79**, 056211 (2009); **89**, 029907 (2014).
11. D. Leykam, S. Flach, O. Bahat-Treidel and A. S. Desyatnikov, *Phys. Rev. B* **88**, 224203 (2013); G. Gligorić, K. Rayanov and S. Flach, *Europhys. Lett.* **101**, 10011 (2013).
12. T. V. Lapyeva, J. D. Bodyfelt and S. Flach, *Europhys. Lett.* **98**, 60002 (2012); M. Larcher, T. V. Lapyeva, J. D. Bodyfelt, F. Dalfovo, M. Modugno and S. Flach, *New J. Phys.* **14**, 103036 (2012).
13. C. Skokos and S. Flach, *Phys. Rev. E* **82**, 016208 (2010).
14. M. V. Ivanchenko, T. V. Lapyeva and S. Flach, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 240602 (2011).
15. C. Skokos, I. Gkolas and S. Flach, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 064101 (2013).
16. J. D. Bodyfelt, T. V. Lapyeva, G. Gligoric, D. O. Krimer, C. Skokos and S. Flach, *Int. J. Bifurcation Chaos* **21**, 2107 (2011).
17. S. Flach, *Springer Proc. Phys.* **173**, 45 (2016).
18. T. V. Lapyeva, M. V. Ivanchenko and S. Flach, *J. Phys. A* **47**, 493001 (2014).
19. A. Pikovsky, *J. Stat. Mech., Theory Exp.* **2015**, P08007 (2015).

20. F. A. B. F. de Moura, I. Gléria, I. F. dos Santos and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 096401 (2009).
21. Z. Pan, S. Xiong and C. Gong, *Phys. Rev. E* **56**, 4744 (1997); H. Yamada and K. Iguchi, *Adv. Condens. Matter Phys.* **2010**, 380710 (2010).
22. G. Kopidakis, S. Komineas, S. Flach and S. Aubry, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 084103 (2008); A. S. Pikovsky and D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 094101 (2008); D. Hajnal and R. Schilling, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 124101 (2008).
23. Y. Lahini, A. Avidan, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D. N. Christodoulides and Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 013906 (2008).
24. J.-K. Xue and A.-X. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 180401 (2008); N. Akhmediev, A. Ankiewicz and J. M. Soto-Crespo, *Phys. Rev. E* **80**, 026601 (2009); S. A. Ponomarenko and G. P. Agrawal, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 013901 (2006); A. Maluckov, L. Hadzievski, N. Lazarides and G. P. Tsironis, *Phys. Rev. E* **79**, 025601(R) (2009); T. Anker, M. Albiez, R. Gati, S. Hunsmann, B. Eiermann, A. Trombettoni and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 020403 (2005).
25. Z. Pan, S. Xiong and C. Gong, *Phys. Rev. B* **56**, 1063 (1997).
26. J. E. Macías-Díaz and I. E. Medina-Ramírez, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **14**, 3200 (2009).
27. N. J. Zabusky, *Chaos* **15**, 015102 (2005).
28. T. Dauxois, M. Peyrard and S. Ruffo, *Eur. J. Phys.* **26**, S3 (2005).
29. L. Brizhik, A. P. Chetverikov, W. Ebeling, G. Röpke and M. G. Velarde, *Phys. Rev. B* **85**, 245105 (2012).
30. A. P. Chetverikov, W. Ebeling and M. G. Velarde, *Phys. D* **240**, 1954 (2011).
31. D. Hennig, M. G. Velarde, W. Ebeling and A. Chetverikov, *Phys. Rev. E* **78**, 066606 (2008).
32. D. Hennig, A. Chetverikov, M. G. Velarde and W. Ebeling, *Phys. Rev. E* **76**, 046602 (2007).
33. V. A. Makarov, M. G. Velarde, A. P. Chetverikov and W. Ebeling, *Phys. Rev. E* **73**, 066626 (2006).
34. D. Hennig, C. Neissner, M. G. Velarde and W. Ebeling, *Phys. Rev. B* **73**, 024306 (2006).
35. A. S. Davydov, *Solitons in Molecular Systems*, 2nd edn. (Reidel, Dordrecht, 1991).
36. A. C. Scott, *Phys. Rep.* **217**, 1 (1992).
37. A. S. Davydov, *Phys. Scr.* **20**, 387 (1979).
38. A. S. Davydov, *J. Theor. Biol.* **66**, 379 (1977).
39. A. S. Davydov, *Biology and Quantum Mechanics* (Pergamon, New York, 1982).
40. B. J. Alder, K. J. Runge and R. T. Scalettar, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3022 (1997).
41. L. S. Brizhik and A. A. Eremko, *Phys. D* **81**, 295 (1995).
42. O. G. Cantu Ross, L. Cruzeiro, M. G. Velarde and W. Ebeling, *Eur. Phys. J. B* **80**, 545 (2011).
43. M. G. Velarde and C. Neissner, *Int. J. Bifurcation Chaos* **18**, 885 (2008).
44. M. G. Velarde, W. Ebeling and A. P. Chetverikov, *Int. J. Bifurcation Chaos* **21**, 1595 (2011).
45. A. P. Chetverikov, W. Ebeling and M. G. Velarde, *Eur. Phys. J. B* **80**, 137 (2011).
46. M. G. Velarde, W. Ebeling and A. P. Chetverikov, *Int. J. Bifurcation Chaos* **15**, 245 (2005).
47. M. G. Velarde, *J. Comput. Appl. Math.* **233**, 1432 (2010).
48. M. G. Velarde, W. Ebeling and A. P. Chetverikov, *Eur. Phys. J. B* **85**, 291 (2012).
49. W. Ebeling, A. P. Chetverikov, G. Röpke and M. G. Velarde, *Contrib. Plasma Phys.* **53**, 736 (2013).

50. A. P. Chetverikov, W. Ebeling and M. G. Velarde, *Eur. Phys. J., Spec. Top.* **222**, 2531 (2013).
51. M. G. Velarde, A. P. Chetverikov, W. Ebeling, E. G. Wilson and K. J. Donovan, *Europhys. Lett.* **106**, 27004 (2014).
52. A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno and M. G. Velarde, *Phys. Rev. E* **100**, 052203 (2019).
53. M. O. Sales and F. A. B. F. de Moura, *J. Phys., Condens. Matter* **26**, 415401 (2014).
54. J. L. L. dos Santos, M. O. Sales, A. Ranciaro Neto and F. A. B. F. de Moura, *Phys. Rev. E* **95**, 052217 (2017).
55. M. Kataoka, M. R. Astley, A. L. Thorn, C. H. W. Barnes, C. J. B. Ford, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, D. A. Ritchie and M. Pepper, *Phys. E, Low-Dimens. Syst. Nanostruct.* **40**, 1017 (2008).
56. M. Kataoka, M. R. Astley, A. L. Thorn, D. K. L. Oi, C. H. W. Barnes, C. J. B. Ford, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, D. A. Ritchie and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 156801 (2009).
57. J.-H. He, J. Gao and H.-Z. Guo, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 122107 (2010).
58. S. Hermelin, S. Takada, M. Yamamoto, S. Tarucha, A. D. Wieck, L. Saminadayar, C. Bäuerle and T. Meunier, *Nature* **477**, 435 (2011).
59. R. P. G. McNeil, M. Kataoka, C. J. B. Ford, C. H. W. Barnes, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer and D. A. Ritchie, *Nature* **477**, 439 (2011).
60. V. Miseikis, J. E. Cunningham, K. Saeed, R. O'Rourke and A. G. Davies, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 133105 (2012).
61. S. Takada *et al.*, *Nat. Commun.* **10**, 4557 (2019).
62. T.-K. Hsiao *et al.*, *Nat. Commun.* **11**, 917 (2020).
63. R. Ito, S. Takada, A. Ludwig, A. D. Wieck, S. Tarucha and M. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 070501 (2021).
64. Y. Zhou, N. Zhang, D. J. Bisharat, R. J. Davis, Z. Zhang, J. Friend, P. R. Bandaru and D. F. Sievenpiper, arXiv:2111.12249.
65. M. P. Alan and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, 1987), pp. 71–80.
66. F. A. B. F. de Moura, *Int. J. Mod. Phys. C* **22**, 63 (2011).

ANEXO C . Artigo: Propagação mágnon-rede
em uma cadeia de Morse: o papel
desempenhado pela interação *spin*-rede e a
condição inicial.



PHYSICAL SCIENCES

Magnon-lattice propagation in a Morse chain: the role played by the spin-lattice interaction and the initial condition

MARCONI SILVA SANTOS JUNIOR, MESSIAS DE OLIVEIRA SALES &
FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA

Abstract: Our research focuses on studying magnon dynamics in a Morse lattice. We used a Heisenberg Hamiltonian to represent the spins while a Morse formalism governed the lattice deformations. The strength of the spin-spin interaction depended on the distance between neighboring spins, which followed an exponential pattern. We explored various initial conditions for the lattice and spin wave function and observed how they affected the magnon-lattice propagation. Additionally, we analyzed the impact of the parameter that controlled the difference in time scales between spin and lattice deformation propagation.

Key words: localization; disorder; Anderson localization; nonlinear lattice.

INTRODUCTION

The magnon dynamics under the effect of magnetoelastic coupling has attracted a high interest Masciocchi et al. (2022), Chen et al. (2023), Luo et al. (2023), Gries et al. (2022), Cong et al. (2022), Challali et al. (2023), Sun et al. (2022), Holanda et al. (2018), Xiong et al. (2017), Li et al. (2020), Hayashi & Ando (2018), Weiler et al. (2012), Zhang et al. (2019, 2020), Sasaki et al. (2021), Mingran et al. (2020), Morais et al. (2021), Sales et al. (2018, 2023). In ref. Chen et al. (2023) the authors investigate the magnon propagation using a Boltzmann method framework which includes magnon-phonon interaction and diverse scattering terms. They solved the effective equations and detailed some abnormal phenomena observed in several experiments. Zhang et al. (2019) demonstrates that the magnon-phonon coupling controls the thermal Hall effect on a ferromagnetic square lattice featuring Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Li et al. (2020) reported the existence of collective antiferromagnetic magnon-phonon pair formation in an insulator Cr_2O_3 . The results in ref. Hayashi & Ando (2018) indicate that the magnon-phonon coupling could amplify spin pumping in a Pt/YIG bi-layer film. Mingran et al. (2020) reported the first observation of the magneto-rotation coupling in a perpendicularly anisotropic magnetic film. They also introduce the theoretical background. Sales et al. (2018) investigated the magnon propagation in a Fermi-Pasta-Ulam. They studied the spin dynamics using a quantum Heisenberg Hamiltonian with the ferromagnetic ground state. The magnon-lattice interaction was introduced by considering the spin-spin interaction terms as a function of the distance between the spins. Solving the dynamics equations, they demonstrated the existence of a magnon-soliton mode.

Morais et al. (2021) investigate the propagation of magnon states coupled to the harmonic modes of a linear lattice. It was considered an adiabatic approximation to deduce an effective quantum equation to describe the magnon dynamics. The authors demonstrate the existence of a self-trapping transition to the magnon state. Sales et al. (2018), the dynamics of magnon-lattice it was considered by writing the Heisenberg Hamiltonian in a nonlinear Morse chain. The authors demonstrate that the lattice deformation embodies a finite fraction of the spin wave function in the robust spin-lattice coupling regime, generating a mobile magnon-lattice excitation.

In this work, we revisit the problem of magnon dynamics in a Morse lattice. We designed the spin-spin coupling using a Heisenberg model. The intensity of the spin-spin interaction fits an exponential dependent on the distance between nearest-neighbor spins. This framework provides an effective spin-lattice interaction, and a single tunable parameter controls the intensity of this interaction. We will investigate the magnon-lattice dynamics considering a wide range of initial conditions. Our calculations indicate that the magnon-lattice pair formation strongly depends on the initial condition's width. We will also investigate the dependence of the magnon-lattice propagations as a function of the time-scales difference between spin and lattice propagation. Our results suggest that magnon-lattice pair formation occurs for a small amount of magnon-lattice interaction as the time scale difference increases.

MODEL

Our model is a quantum one-dimensional Heisenberg model with N spin $1/2$ on a nonlinear Morse chain. The spin-spin interaction is strongly dependent on the distance between nearest-neighbor spins. The complete quantum Hamiltonian is given by Evangelou & Katsanos (1992), de Moura et al. (2002):

$$H_S = - \sum_{y=1}^N \{J_{y,y+1} \vec{S}_y \vec{S}_{y+1}\}. \quad (1)$$

The interaction between spins y and $y + 1$ is given by $J_{y,y+1} = J e^{-\alpha(X_{y+1}-X_y)}$. X_y is the displacement of spin y from its equilibrium position. We emphasize again that we are dealing with a one-dimensional geometry. Therefore, without lattice vibrations, all spins are in equally spaced positions (in equilibrium, the distance between nearest-neighbor spins is the lattice spacing, an adimensional parameter $l_s = 1$). However, our model will consider that the spins can move around their equilibrium position. The spatial movement of the spins produces variations in the value of the spin-spin interaction. Our model will consider that these variations follow this exponential dependence shown earlier. The parameter α characterizes this exponential dependence within this formalism, thus controlling the effective spin-lattice interaction. The lattice dynamics here will be governed by a Morse potential represented by the classical Hamiltonian Hennig et al. (2007), Ikeda et al. (2007), de Lima & de Cavalho (2012), Carrillo et al. (2013):

$$H_L = \sum_{y=1}^N \frac{p_y^2}{2} + \sum_{y=1}^N \{1 - \exp[-(X_y - X_{y-1})]\}^2. \quad (2)$$

Here, P_y represents the particle moment at site y . We emphasize that we are using the dimensionless representation considered in ref. Hennig et al. (2007). The time is scaled as $t \rightarrow \omega t$, with ω representing the frequency of oscillations around the minimum of the Morse potential. The energy scale is measured in units of the depth of the Morse potential Hennig et al. (2007). The magnon dynamics is represented by the time-dependent Schrödinger equation for ($\hbar = 1$) defined as Sales et al. (2018):

$$\begin{aligned}
 i \frac{du_y(t)}{dt} = & \frac{\tau}{2} \{ [\exp(-\alpha(X_{y+1} - X_y)) \\
 & + \exp(-\alpha(X_y - X_{y-1}))] u_y(t) \\
 & - \exp(-\alpha(X_y - X_{y-1})) u_{y-1}(t) \\
 & - \exp(-\alpha(X_{y+1} - X_y)) u_{y+1}(t) \}.
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

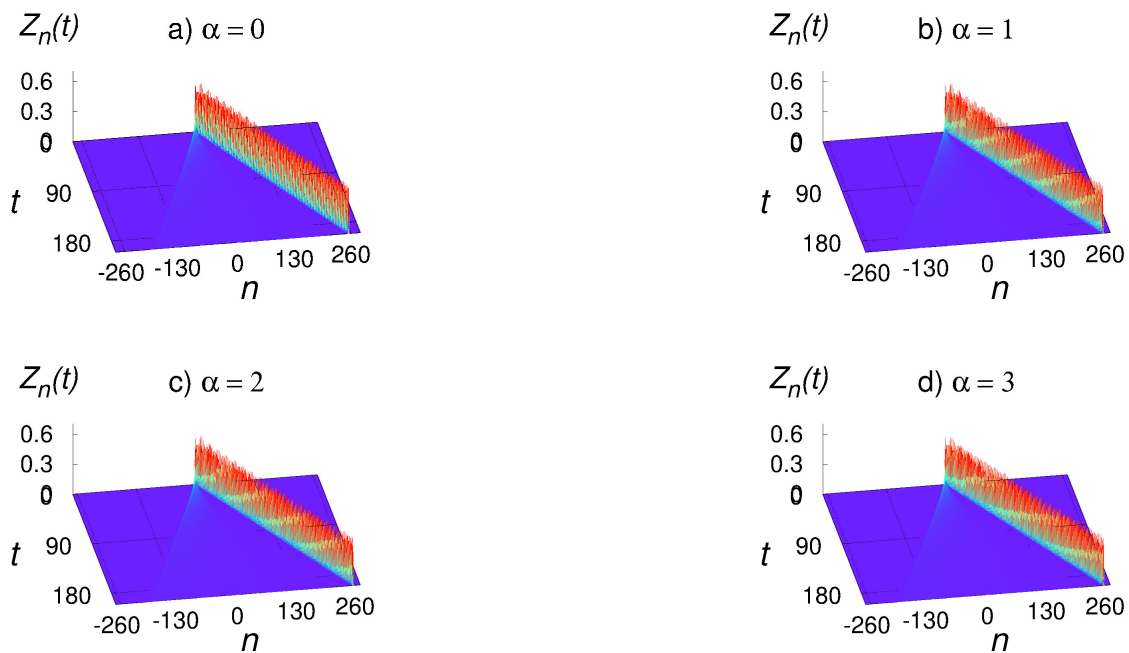


Figure 1. The lattice deformation Z_n versus t and n where $n = y - N/2 = 0$ represents the center of the chain. Calculations were done for $v_0 = 1, \sigma_s = 0.5, \sigma_L = 0.5, \tau = 10$ and $\alpha = 0, 1, 2, 3$

To clarify, we want to point out that the previous equations were written considering a ferromagnetic ground state denoted as $|0\rangle$ and a set of kets represented by $|y\rangle = S_y^+ |0\rangle$. Therefore, the $u_y(t)$ value corresponds to the wave function amplitude associated with the spin deviation at position

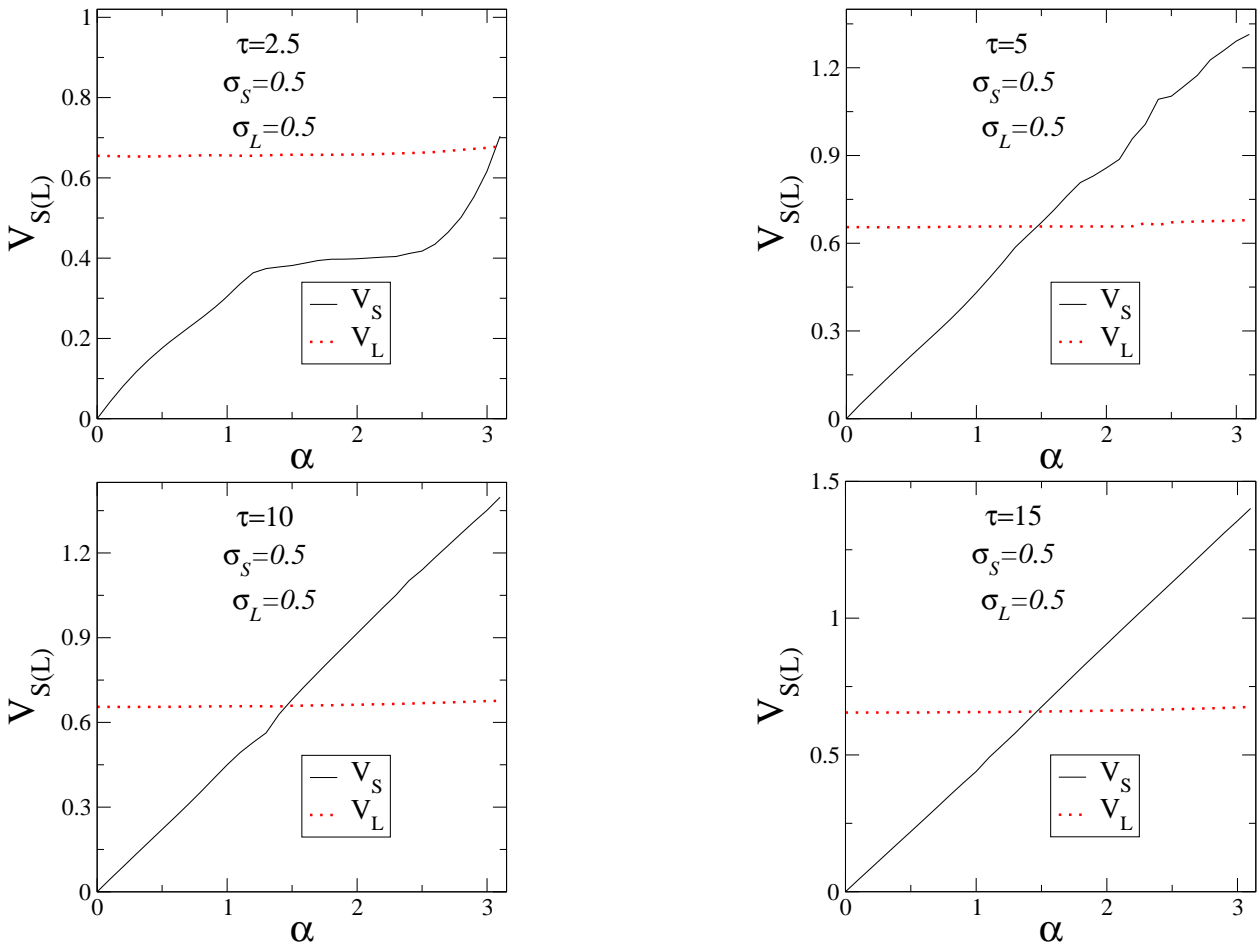


Figure 2. Magnon and lattice deformation velocities [V_S (black solid line) and V_L (red dotted line)] versus α . We have considered $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0.5$, $\sigma_L = 0.5$ and $\tau = 2.5$ up to 15.

y. By utilizing the Hamilton formalism, we have derived the equations governing the dynamics of the lattice:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 X_y}{dt^2} &= \{1 - \exp[-(X_{y+1} - X_y)]\} \exp[-(X_{y+1} - X_y)] \\
 &- \{1 - \exp[-(X_y - X_{y-1})]\} \exp[-(X_y - X_{y-1})] \\
 &+ \frac{J\alpha}{2} \left[e^{-\alpha(X_y - X_{y-1})} (u_y^* u_y + u_{y-1}^* u_{y-1}) \right. \\
 &- e^{-\alpha(X_{y+1} - X_y)} (u_y^* u_y + u_{y+1}^* u_{y+1}) \\
 &+ e^{-\alpha(X_{y+1} - X_y)} (u_{y+1}^* u_y + u_y^* u_{y+1}) \\
 &\left. - e^{-\alpha(X_y - X_{y-1})} (u_{y-1}^* u_y + u_y^* u_{y-1}) \right]. \tag{4}
 \end{aligned}$$

It's important to note that we changed the time scale in the previous equation by rescaling t to ωt , with ω representing the frequency of oscillations around the minimum of the Morse potential Hennig et al. (2007). This step is necessary to account for the difference in timescale between electron dynamics

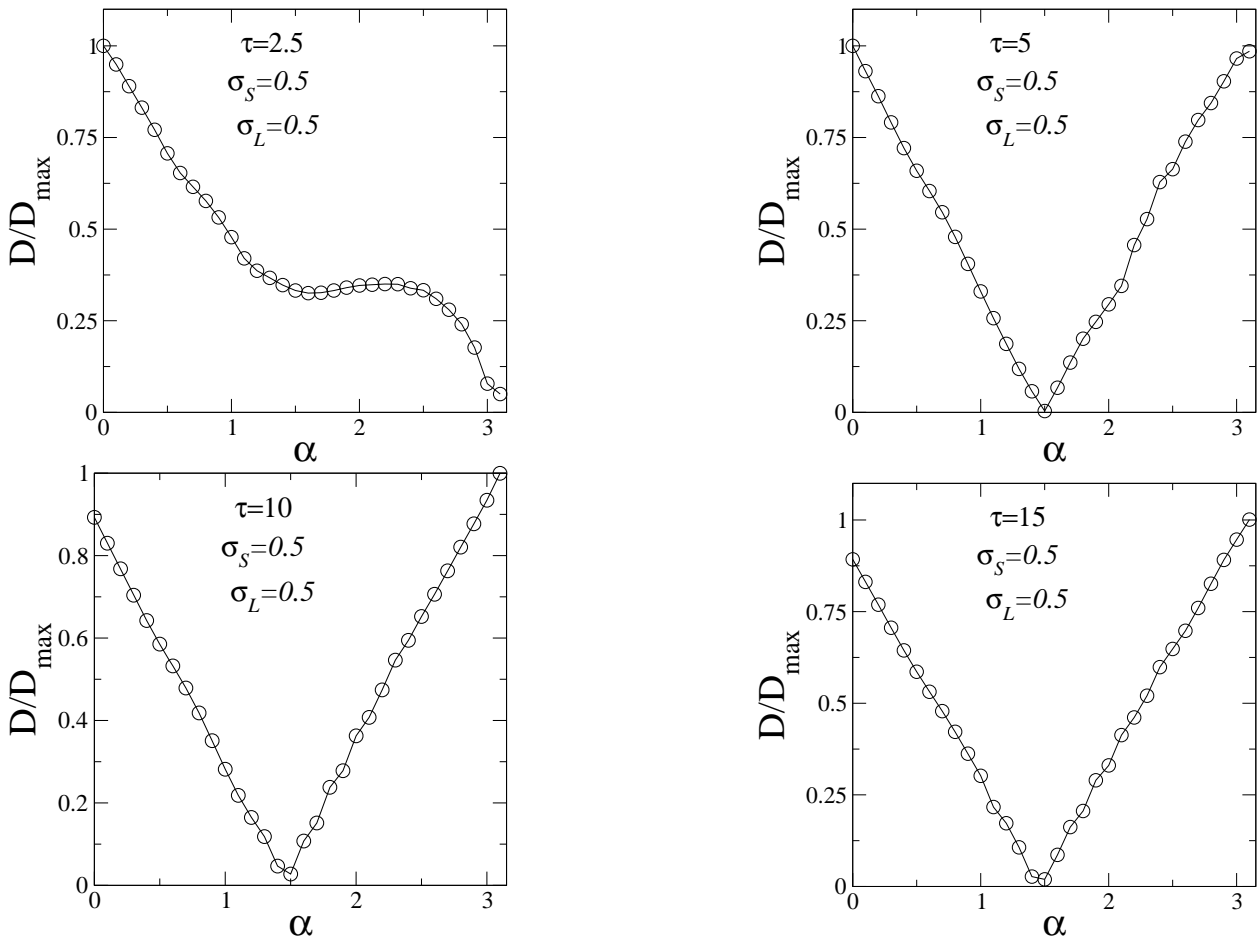


Figure 3. The normalized distance between the Magnon and the lattice deformation (D/D_{max}) versus α . Calculations done for $v_0 = 1$, $\sigma_s = 0.5$, $\sigma_L = 0.5$ and $\tau = 2.5$ up to 15.

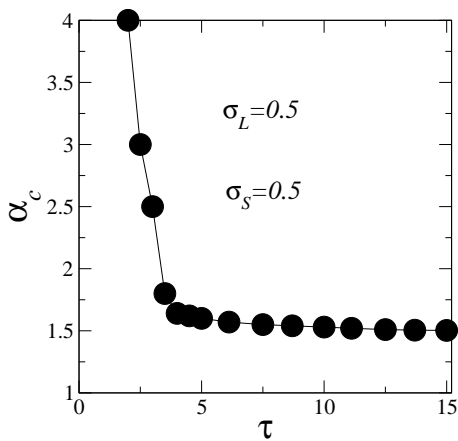


Figure 4. The critical value α_c versus τ for $\sigma_s = \sigma_L = 0.5$.

(which is faster) and lattice vibrations (which is slower) Hennig et al. (2007), Davydov (1991), Scott (1992). To put it simply, this framework involves a factor $\tau = J/(\hbar\omega)$ that multiplies the spin equation Hennig

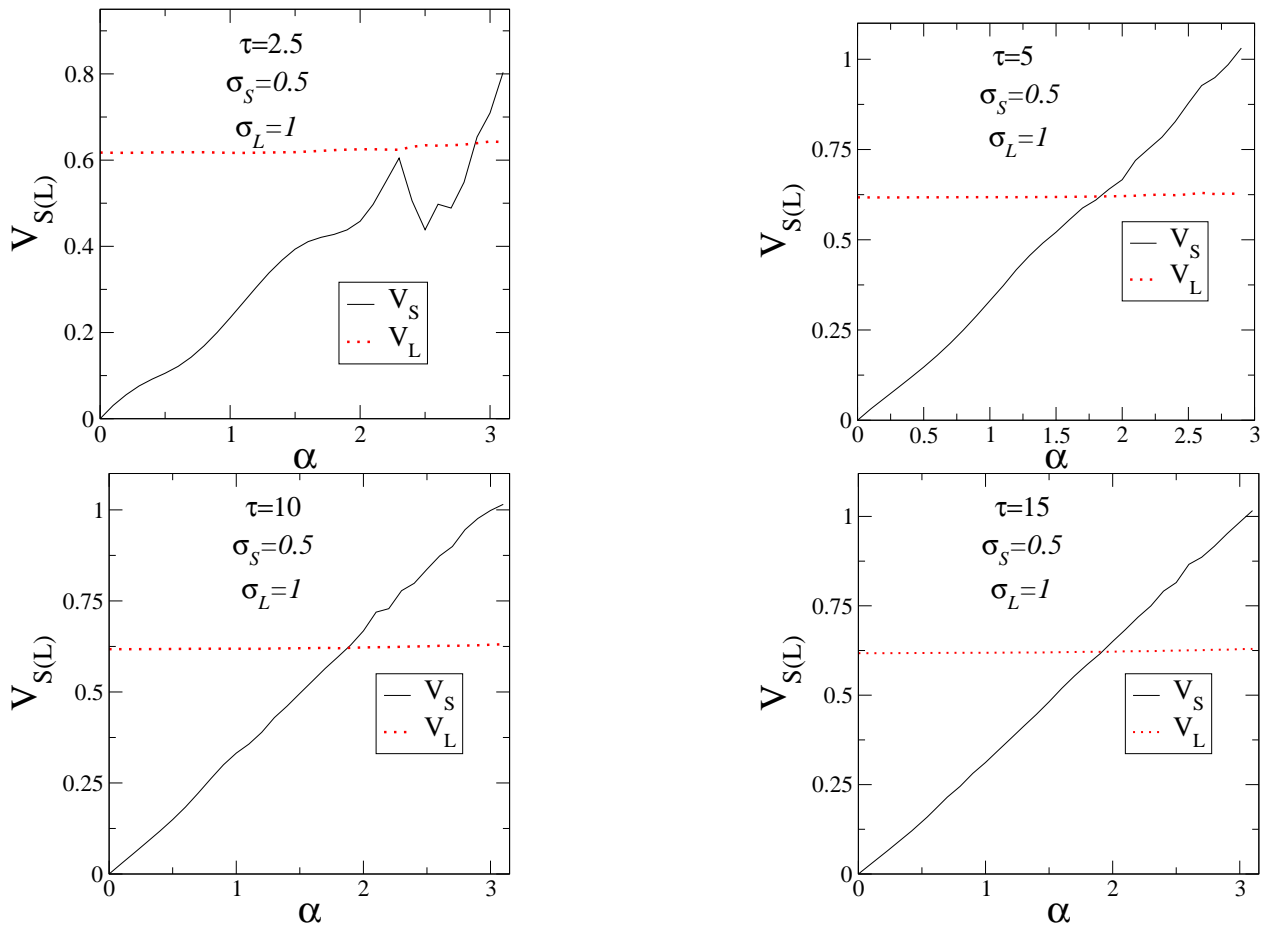


Figure 5. Magnon and lattice deformation velocities [V_S (black solid line) and V_L (red dotted line)] versus α computed using $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0.5$, $\sigma_L = 1$ and $\tau = 2.5$ up to 15.

et al. (2007), Davydov (1991), Scott (1992). In our work, we will use $J = 0.1$, which is in alignment with previous research Hennig et al. (2007), Davydov (1991), Scott (1992), Korotin et al. (2015), Satija et al. (1980), Hutchings et al. (1979), Kadota et al. (1967). The value of τ will be adjustable, but in previous works, it was typically chosen to be around 10 Hennig et al. (2007), Ranciaro-Neto & de Moura (2016), Sales et al. (2018) due to potential differences in time scales between quantum and classical propagation. However, we will explore the effects of varying τ around this value. Our initial conditions will be $u_y(t = 0) = Ae^{-(y-N/2)^2/(4\sigma_S^2)}$, $X_y(t = 0) = 0$, and $P_y(t = 0) = e^{-(y-N/2)^2/(4\sigma_L^2)}$, with A as a normalization constant. We will use a Taylor procedure de Moura (2011) to solve the set of equations 3, and a standard second-order Verlet’s like procedure Allen & Tildesley (1987), da Silva et al. (2019) to solve the lattice dynamics. Our analysis will focus on magnon propagation and lattice deformation dynamics along the chain, which can be observed using the quantity n_S defined as Sales et al. (2018):

$$n_S = \sum_y (y - N/2) |u_y(t)|^2. \tag{5}$$

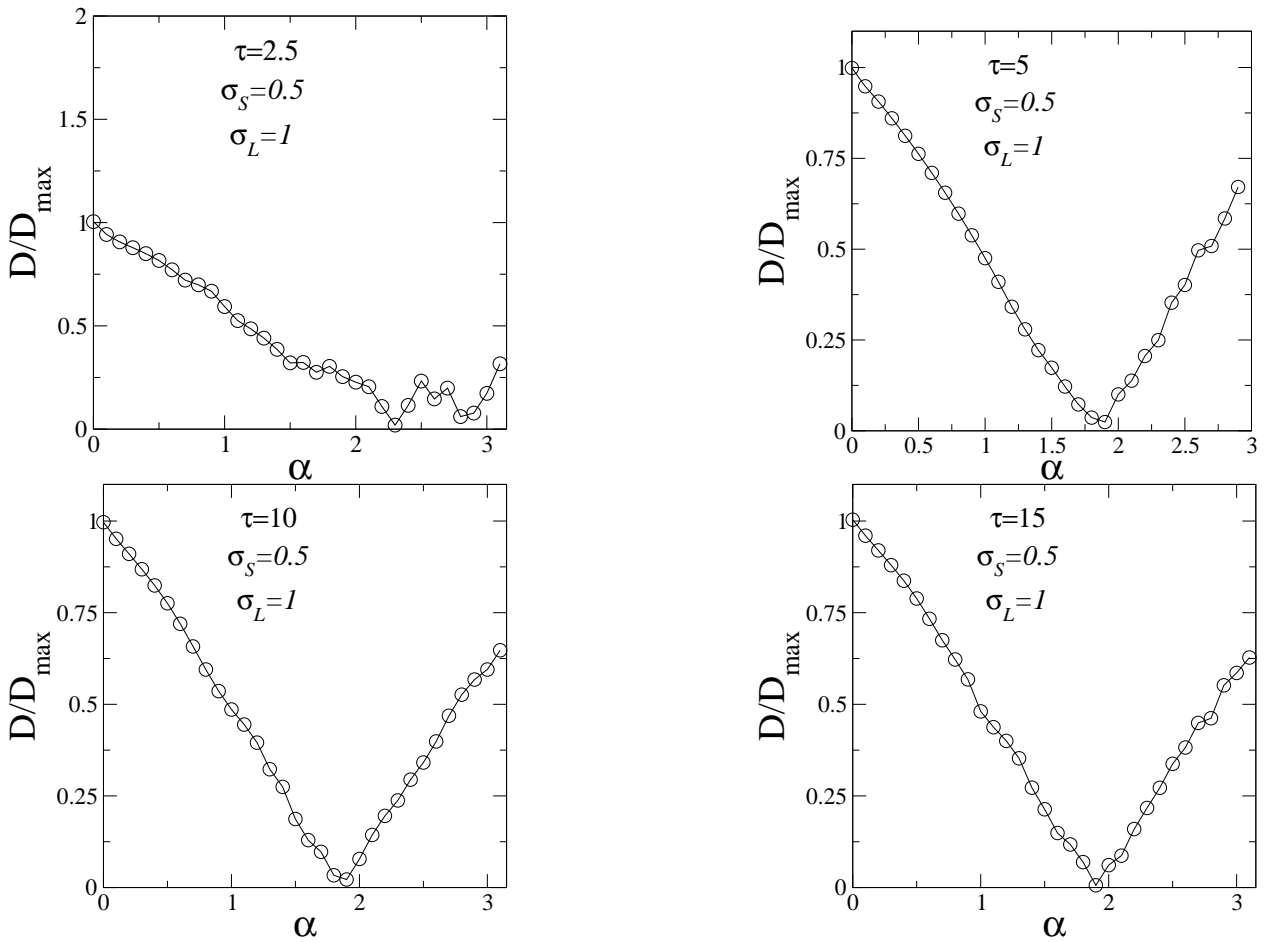


Figure 6. The normalized distance between the Magnon and the lattice deformation (D/D_{max}) versus α computed for $v_0 = 1$, $\sigma_s = 0.5$, $\sigma_L = 1$ and $\tau = 2.5$ up to 15.

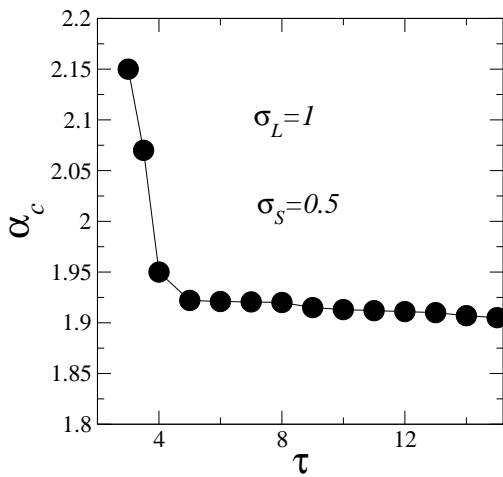


Figure 7. The critical value α_c versus τ for $\sigma_s = 0.5$ and $\sigma_L = 1$.

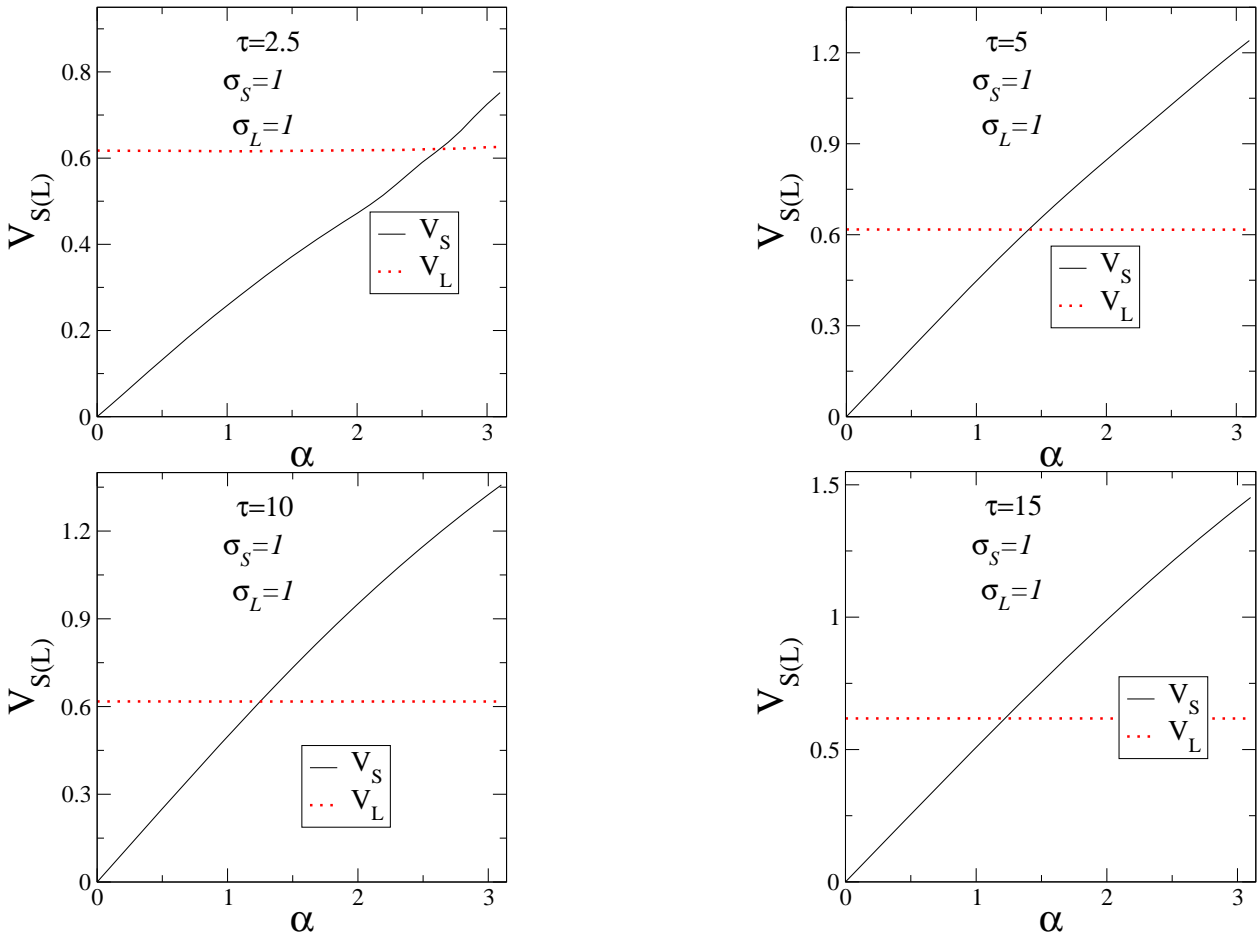


Figure 8. The velocities [V_S (black solid line) and V_L (red dotted line)] versus α computed using $v_0 = 1$, $\sigma_S = 1$, $\sigma_L = 1$ and $\tau = 2.5$ up to 15.

The lattice properties can be analyzed using the mean position of the lattice deformation defined as:

$$n_L = \frac{\sum_y (y - N/2) [1 - e^{-(x_y - x_{y-1})}]^2}{\sum_y [1 - e^{-(x_y - x_{y-1})}]^2}. \tag{6}$$

We want to emphasize that n_S and n_L represent the mean position of the spin-wave excitation and the lattice deformation, respectively. These measurements generally are in units of lattice spacing ($l_S = 1$). Using these quantities, we can obtain the magnon and the lattice deformation velocities V_S and V_L using fittings of the curves $n_S \times t$ and $n_L \times t$. We stress that here we will use a methodology similar to that was used in the previous literature Hennig et al. (2007), Sales et al. (2018). We will follow the propagation of the magnon and the lattice deformation to describe the existence (or not) of magnon-lattice coupled movement. Generally, stable dynamics with $n_S \approx n_L$ and $V_S \approx V_L$ indicate the presence of magnon-lattice pair formation. The nonlinear Morse chain considered here contains a solitonic mode propagation along the chain. We can see this solitonic mode by calculating the lattice deformation Z_y ; this quantity represents a generalized probability that deformation around site y occurs. This is obtained by normalizing $B_y = (1 - e^{[-x_y + x_{y-1}]}]^2$, that is $Z_y = B_y / \sum_y (B_y)$. We will plot

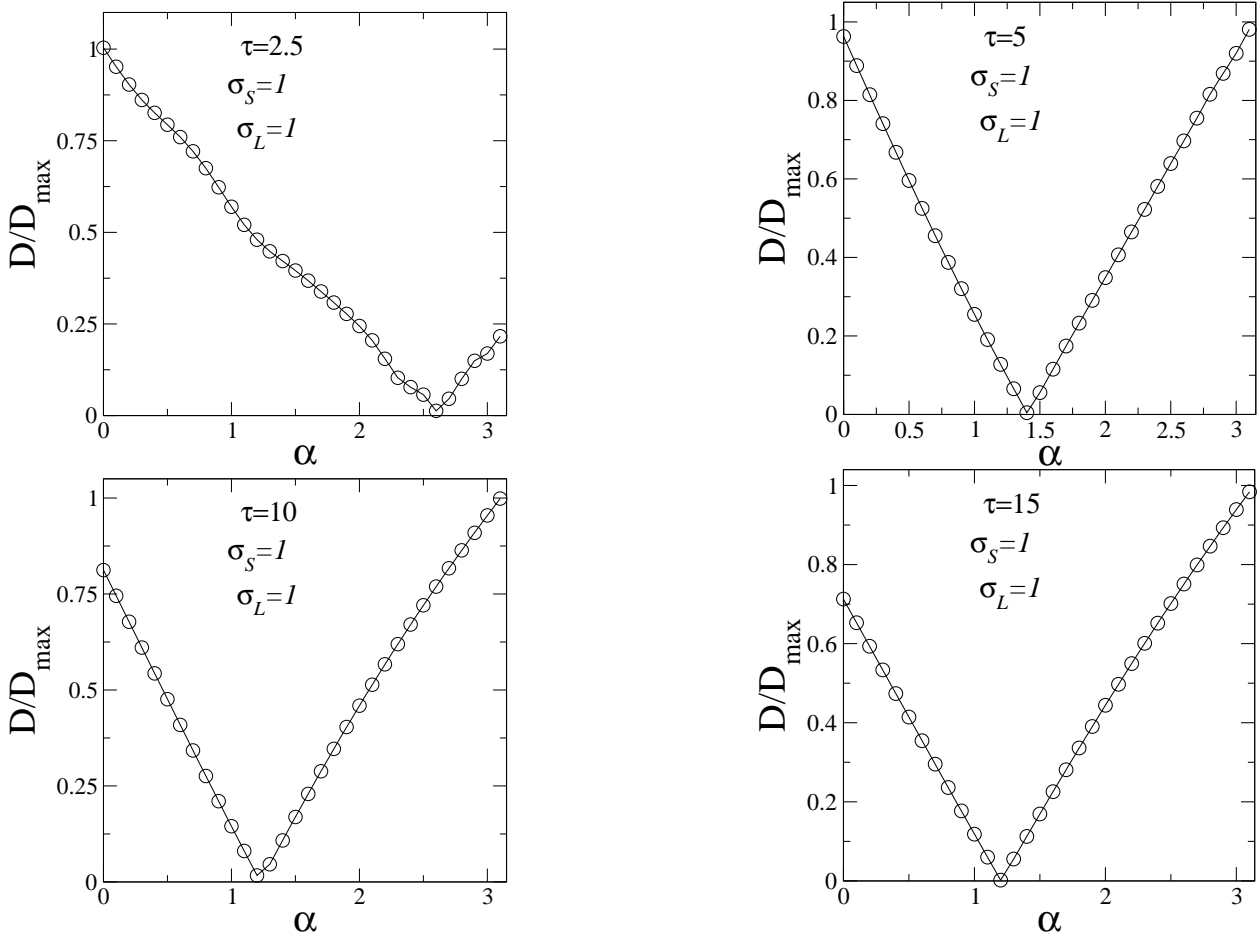


Figure 9. The normalized distance between the Magnon and the lattice deformation (D/D_{max}) versus α computed for $v_0 = 1$, $\sigma_s = 1$, $\sigma_L = 1$ and $\tau = 2.5$ up to 15.

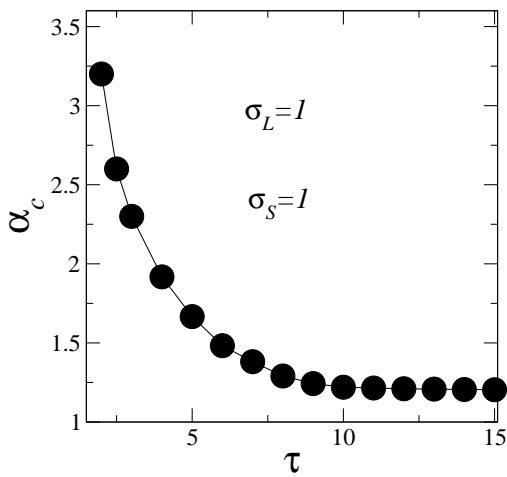


Figure 10. The critical value α_c versus τ for $\sigma_s = \sigma_L = 1$.

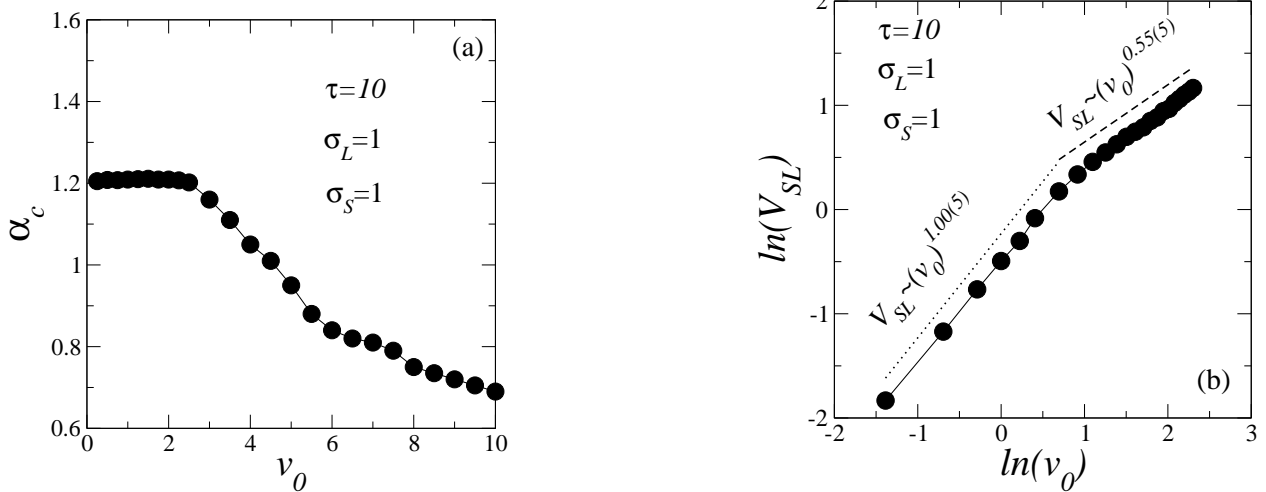


Figure 11. a) The critical value α_c versus v_0 ; b) The magnon-soliton velocity V_{SL} versus v_0 . Calculations were done for $\sigma_L = \sigma_S = 1$ and $\tau = 10$.

$Z_n \times t \times n$ where $n = y - N/2$ (i.e., $n = 0$ represents the center of the chain). In fig. 1 we plot our results for $\alpha = 0, 1, 2, 3$, $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0.5$, $\sigma_L = 0.5$ and $\tau = 10$. We can see that independent of the value of α , the lattice deformation exhibits a stable solitonic mode propagating along the chain. Therefore, the main focus of our work is investigating the existence of a possible magnon-soliton pair formation and its dependence on all tunable parameters.

RESULTS AND DISCUSSION

Our findings on the velocities V_S and V_L in relation to α are presented below. We obtained V_S and V_L through the linear fitting of the curves $n_S \times t$ and $n_L \times t$. Our calculations of n_S and n_L suggest that both quantities exhibit long-term linear behavior, consistent with the solitonic dynamics found in references Sales et al. (2018). We performed these calculations using a time limit of $t_{max} \approx 10^4$. The linear fitting was conducted using the last 20% of the complete time interval, roughly within the time interval [8000, 10000]. We used a Taylor expansion up to the tenth order to solve the quantum equations and a second-order Verlet-like method to solve the classical equations. We performed our numerical procedure using a time step of $\Delta t = 0.001$. It is important to emphasize that this method is faster than the Runge-Kutta formalism de Moura & Domínguez-Adame (2008) for this type of problem. The initial condition was given by : $u_y(t = 0) = Ae^{-(y-N/2)^2/(4\sigma_S^2)}$, $X_y(t = 0) = 0$ and $P_y(t = 0) = v_0 e^{-(y-N/2)^2/(4\sigma_L^2)}$. Here, A is a normalization constant, v_0 is a tunable parameter, and the σ_L and σ_S are larger than zero. We varied the parameter τ within the interval [1, 15]. We considering initially $v_0 = 1$, $\sigma_S = 0.5$, $\sigma_L = 0.5$ and several values of τ . We show our results in figs. 2(a-d). We emphasize that the curves indicate the velocities V_S (black solid line) and V_L (red dotted line) versus α for several values of τ . To construct these curves, we calculate the dynamics of the spin and the lattice for long times for several values of α and τ . We calculate the V_S and V_L curves versus α using a linear fitting. We can see that V_L is roughly independent of α . On another side, spin propagation strongly depends on the spin-lattice interaction parameter α . Let us clarify this important matter in simpler

terms. The lattice's deformation is governed by eq. 4. We can see that when α is small, the nonlinear Morse terms, i.e., the first two terms, dominate over the terms that depend directly on α and the wave functions. Therefore, the soliton velocity remains roughly constant; however, when α increases, the final terms become more significant and have a greater impact on the soliton propagation, causing a slight increase in velocity. On a different note, the behavior of spin dynamics is dictated by equation 3, which shows a significant dependence on the magnitude of α in both the diagonal (first term) and the off-diagonal (last two terms). As such, it was indeed expected that the value of α would influence the magnon's velocity. By analyzing all curves for several of τ we have considered, there is a matching of the magnon's and lattice's velocity ($V_S \approx V_L$) for a specific value of α . This result suggests that for this particular value of α , the magnon and the lattice deformation travel at the same velocity. We stress that it is the first indication that magnon and lattice may move in a kind of "correlated propagation" (like a magnon-lattice pair formation). We can also see that as the parameter τ has increased, this value of α in which the velocities are the same become smaller. To comprehend this phenomenon, we need to emphasize that when τ increases, the off-diagonal terms in the Schrödinger equation become more effective. This results in a stronger coupling with the lattice deformation even for smaller values of α .

We also calculate the long-time mean distance between the magnon and the lattice deformation. The distance is defined as $D = |n_L(t \rightarrow \infty) - n_S(t \rightarrow \infty)|$. We emphasize that D represents also an measurement of the possible existence of the magnon-soliton pair state. In general, bound states exhibit a smaller value of intrinsic internal distances. The authors in ref. Dias et al. (2007) used this kind of measure to detect the existence of electron-electron bound states in the low-dimensional two-electron Hubbard model. We emphasize that we will plot (see figs. 3(a-d)) D/D_{max} versus α where D_{max} represents the maximum of the distance between the magnon and the lattice position. We can observe that for the same value of α in which that $V_L \approx V_S$, we can see that $D/D_{max} \approx 0$, i.e., the magnon and the lattice position are close, thus suggesting the existence of magnon-lattice pair formation. We can see that the critical value of α in which $D/D_{max} \approx 0$ is in good agreement with the critical value found using the velocity curves versus α (see fig. 2). Therefore all measures of D/D_{max} , V_S , and V_L are topological quantities that characterize the propagation of the magnon and the lattice deformation. Our calculations numerically demonstrate that for some specific values of $\alpha = \alpha_c$, the distance D is small, and the magnon and the lattice deformation travel at the same velocity. This result strongly indicates a magnon-soliton pair formation for these special situations.

In fig. 4, we collect the critical value of α versus τ . We stress that for $\alpha = \alpha_c$ the system exhibits a magnon-lattice pair formation, i.e., the magnetic excitation moves along with the lattice vibration and at the same velocity. We emphasize again that the decreasing of α_c with τ is a direct consequence of the role played by τ at the off-diagonal terms at eq. 3. As the τ is increased, the effective off-diagonal term also increases. Increasing the effective spin-spin interaction makes coupling between the spin and the lattice deformations easier. In figures 5 and 6 we consider again $v_0 = 1$ and change the values of σ_S and σ_L respectively to 0.5 and 1; we kept the same range of values of τ . We can observe that the results are qualitatively the same obtained in figs. 2 and 3 i.e.: as the value of τ is increased, the magnon-lattice pair formation is obtained for a specific value of $\alpha = \alpha_c$. We also obtained that as τ is increased α_c decreases (see fig. 7). In figures 8 and 9, we show our results considering $\sigma_S = 1$ and $\sigma_L = 1$, and we kept the same range of values of τ and v_0 . The results obtained are similar to those

in the previous figures. It appears that the magnon-lattice pair only exists when α equals the critical value α_c . This critical value decreases as τ increases, as shown in figure 10.

To summarize the previous results, an initial vibrational Gaussian velocity pulse was introduced into the lattice, and a finite amount of the initial energy propagated along the lattice through the nonlinear solitonic mode. This behavior was observed by tracking the lattice position over time, with our calculations indicating that a finite fraction of the initial energy remained trapped in a finite region of the lattice. This localized pulse could travel along the lattice with a constant velocity of V_L . Additionally, the quantum equation was initialized using a Gaussian initial magnon wave packet, and our calculations showed that the dominant wave packet exhibited a solitonic profile with a position given by $n_S(t) \approx V_S t$. By computing V_S and V_L , we numerically demonstrated that depending on the value of magnon-lattice coupling, we could obtain a good indication of magnon-soliton pair formation. For certain values of $\alpha = \alpha_c$, our calculations indicated that $n_S \approx n_L$ and $V_S \approx V_L$. In ref. Sales et al. (2018), the possibility of magnon-soliton propagation in nonlinear lattices was demonstrated considering localized initial states (i.e., $\sigma_L = \sigma_S = 0$). However, we have discovered that broad initial conditions can also lead to magnon-soliton propagation. The critical value for the occurrence of magnon-solitons depends on the width of the initial conditions and the value of τ . The parameter τ measures the time scale difference between the magnon and lattice deformation and acts as the intensity of the effective spin-spin interaction within the quantum equations. This spin-spin interaction is also the key to the magnon-lattice interaction. As τ increases, the spin-lattice terms become stronger, making it easier to promote magnon-soliton pair formation.

Before we finish our work, we need to examine how our results vary with the value of v_0 . Specifically, we want to see how the formation of magnon-soliton pairs is affected by the strength of the initial impulse. To do this, we conducted many numerical experiments with different values of v_0 , which allowed us to observe the signatures of magnon-soliton pairs. We discovered that within the range of v_0 values between 1 and 10, a magnon-soliton pair exists when α equals a certain value, denoted as α_c . However, this critical value depends on the value of v_0 . For instance, the results we obtained for $\sigma_S = \sigma_L = 1$ and $\tau = 10$ (refer to fig. 11(a)) revealed that when v_0 is low (less than 3), the critical value remains stable at around $\alpha_c = 1.205$, while for v_0 values greater than 3, the critical value decreases by approximately half. This decrease in α_c with increasing v_0 may seem counterintuitive, but we believe it is mainly due to the intensity of the solitonic mode. As the initial impulse grows, the soliton gains more intensity, resulting in an increased spin-lattice interaction that favors the magnon-soliton pairing. Our calculations show that regardless of the values of σ_L and σ_S , the results remain qualitatively the same. The velocity of the magnon-soliton pair (V_{SL}) is also dependent on the initial velocity v_0 . In fig. 11(b), we observe that for small v_0 , $V_{SL} \propto v_0$. For $v_0 > 3$, $V_{SL} \propto v_0^{0.55(5)}$. It is essential to note that the results shown in fig. 11 do not depend on the values of σ_L , σ_S , and τ . Generally, as velocity increases, the solitonic mode becomes faster, resulting in a faster magnon-soliton pair.

SUMMARY AND CONCLUSIONS

Our research delves into the behavior of a single magnon state in a nonlinear Morse chain, considering the magnon-lattice coupling through the Heisenberg spin-spin term that directly depends on the spin positions. We begin with a Gaussian wave packet for the magnon state and a Gaussian impulse

packet for the lattice. The velocity intensity and width of these initial Gaussian pulses are adjustable parameters in our model. We also vary the time scales between the magnon and lattice dynamics. We provide a detailed numerical analysis of how magnon-soliton pairs propagate and their dependence on these parameters. Our findings reveal that magnon-soliton propagations are attainable for specific values of the magnon-lattice interaction (called α_c in our model) and that this critical value is highly reliant on the width of the initial Gaussian pulses. Our numerical calculations indicate that increasing the velocity of the initial Gaussian pulse decreases the critical value of spin-lattice interaction (α_c). Furthermore, as the time difference between the magnon and lattice dynamics increases, the intensity of magnon-lattice coupling needed to promote pair formations decreases. Overall, our study underscores the importance of the initial conditions and the specifics of the magnon/lattice dynamics in the existence of magnon-soliton pairs in nonlinear chains. We demonstrate that a time difference of $\tau \geq 10$ yields a more reliable existence of magnon-lattice coupling, consistent with previous research. Our work is intended to inspire further research in this area.

Acknowledgments

This work was partially supported by Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) and Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), CNPq-Rede Nanobioestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency).

REFERENCES

- ALLEN MP & TILDESLEY TJ 1987. Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press, p.71-80.
- CARRILLO JA, MARTIN S & PANFEROV V 2013. A new interaction potential for swarming models. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 260: 112-126.
- CHALLALI R, SAIT S, BOURAHLA B & FERRAH L 2023. Localized Surface Magnon Modes in Cubic Ferromagnetic Lattices. *SPIN* 13: 2350001.
- CHEN C, LI Y & ZHANG J 2023. Characteristics of magnon-phonon coupling in magnetic insulator based on the Boltzmann equation. *AIP Advances* 13: 025221.
- CONG A, LIU J, XUE W, LIU H, LIU Y & SHEN K 2022. Exchange-mediated magnon-phonon scattering in monolayer CrI_3 . *Phys Rev B* 106: 214424.
- EVANGELOU SN & KATSANOS DE 1992. Super-diffusion in random chains with correlated disorder. *Phys Lett A* 164: 456-464.
- DA SILVA LD, RANCIARO-NETO A, SALES MO, DOS SANTOS JLL & DE MOURA FABF 2019. Propagation of vibrational modes in classical harmonic lattice with correlated disorder. *Ann Braz Acad Sci* 91(2): e20180114.
- DAVYDOV AS 1991. Solitons in Molecular Systems. 2nd ed., Reidel, Dordrecht.
- DE LIMA EF & DE CARVALHO RE 2012. Effects of oscillatory behavior of the dipole function on the dissociation dynamics of the classical driven Morse oscillator. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 241: 1753-1757.
- DE MOURA FABF, COUTINHO-FILHO MD, RAPOSO EP & LYRA ML 2002. Delocalization and spin-wave dynamics in ferromagnetic chains with long-range correlated random exchange. *Phys Rev B* 66: 014418.
- DE MOURA FABF 2011. Dynamics of one-electron in a one-dimensional systems with an aperiodic hopping distribution. *Int J M Phys C* 22: 63-69.
- DE MOURA FABF & DOMÍNGUEZ-ADAME F. 2008. Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder *Eur Phys J B* 66: 165-169.
- DIAS WS, NASCIMENTO EM, LYRA ML & DE MOURA FABF 2007. Frequency doubling of Bloch oscillations for interacting electrons in a static electric field *Phys Rev B* 76: 155124.
- GRIES L, JONAK M, ELGHANDOUR A, DEY K & KLINGELER R 2022. Role of magnetoelastic coupling and magnetic anisotropy in MnTiO_3 . *Phys Rev B* 106: 174425.
- HAYASHI H & ANDO K 2018. Spin Pumping Driven by Magnon Polarons. *Phys Rev Lett* 121: 237202.
- HENNIG D, CHETVERIKOV A, VELARDE MG & EBELING W 2007. Electron capture and transport mediated by lattice solitons. *Phys Rev E* 76: 046602.

- HOLANDA J, MAIOR DS & AZEVEDO A 2018. Detecting the phonon spin in magnon-Phonon conversion experiments. *Nature Phys* 14: 500-506.
- HUTCHINGS MT, MILNE JM & IKEDA H 1979. Spin wave energy dispersion in $KCuF_3$: a nearly one-dimensional spin-1/2 antiferromagnet. *Journal of Physics C: Solid State Physics* 12: L739.
- IKEDA K, DOI Y, FENG BF & KAWAHARA T 2007. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 225: 184-196.
- KADOTA S, YAMADA I, YONEYAMA S & HIRAKAWA K 1967. Formation of One-Dimensional Antiferromagnet in $KCuF_3$ with the Perovskite Structure. *Journal of the Physical Society of Japan* 23: 751-756.
- KOROTIN DMM, MAZURENKO VV, ANISIMOV VI & STRELTSOV SV 2015. Calculation of exchange constants of the Heisenberg model in plane-wave-based methods using the Green's function approach. *Phys Rev B* 91: 224405.
- LI J, SIMENSEN HT, REITZ D, SUN Q, YUAN W, LI C, TSEKOVNYAK Y, BRATAAS A & SHI J. 2020. Observation of Magnon Polarons in a Uniaxial Antiferromagnetic Insulator. *Phys Rev Lett* 125: 217201.
- LI Y, ZHAO C, ZHANG W, HOFFMANN A & NOVOSAD V. 2021. Advances in coherent coupling between magnons and acoustic phonons. *APL Materials* 9: 060902.
- LUO J ET AL. 2023. Evidence for Topological Magnon-Phonon Hybridization in a 2D Antiferromagnet down to the Monolayer Limit. *Nano Lett* 23: 2023-2030.
- MASCIOCCHI G ET AL. 2022. Control of magnetoelastic coupling in Ni/Fe multilayers using He^+ ion irradiation. *Appl Phys Lett* 121: 182401.
- MINGRAN X, KEI Y, JORGE P, KORBINIAN B, BIVAS R, KATSUYA M, HIROMASA T, DIRK G, SADAMICHI M & YOSHICHIKA O. 2020. Nonreciprocal surface acoustic wave propagation via magneto-rotation coupling. *Science Advances* 6: 32.
- MORAIS D, LYRA ML, DE MOURA FABF & DIAS WS. 2020. The self-trapping transition of one-magnon excitations coupled to acoustic phonons. *Phys Rev Lett* 506: 166798.
- MORAIS D, DE MOURA FABF & DIAS WS. 2021. Magnon-polaron formation in XXZ quantum Heisenberg chains. *Phys Rev B* 103: 195445.
- RANCIARO-NETO A & DE MOURA FABF. 2016. Electronic dynamics under effect of a nonlinear Morse interaction and a static electric field. *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat* 40: 6-14.
- SALES MO, NETO AR & DE MOURA FABF. 2018. Spin-wave dynamics in nonlinear chains with spin-lattice interactions. *Phys Rev E* 98: 062136.
- SALES MO, NETO AR & DE MOURA FABF. 2023. Magnon-lattice dynamics in a Heisenberg-Morse model with spin-lattice interaction. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 443: 133564.
- SASAKI R, NII Y & ONOSE Y. 2021. Magnetization control by angular momentum transfer from surface acoustic wave to ferromagnetic spin moments. *Nat Commun* 12: 2599.
- SATIJA SK, AXE JD, SHIRANE G, YOSHIZAWA H & HIRAKAWA K. 1980. Neutron scattering study of spin waves in one-dimensional antiferromagnet $KCuF_3$. *Phys Rev B* 21: 2001.
- SCOTT AC. 1992. Davydov's soliton. *Phys Rep* 217: 1-67.
- SUN Y-J, LAI J-M, PANG S-M, LIU X-L, TAN P-H & ZHANG J 2022. Magneto-Raman Study of Magnon-Phonon Coupling in Two-Dimensional Ising Antiferromagnetic $FePS_3$. *Phys Chem Lett* 13: 1533-1539.
- WEILER M, HUEBL H, GOERG FS, CZESCHKA FD, GROSS R & GOENNENWEIN STB. 2012. Spin Pumping with Coherent Elastic Waves. *Phys Rev Lett* 108: 176601.
- XIONG Z, DATTA T, STIWINTER K & YAO D-X 2017. Magnon-phonon coupling effects on the indirect K-edge resonant inelastic x-ray scattering spectrum of a two-dimensional Heisenberg antiferromagnet. *Phys Rev B* 96: 144436.
- ZHANG X, ZHANG Y, OKAMOTO S & XIAO D. 2019. Thermal Hall Effect Induced by Magnon-Phonon Interactions. *Phys Rev Lett* 123: 167202;
- ZHANG S, GO G, LEE K-J & KIM SK. 2020. $SU(3)$ Topology of Magnon-Phonon Hybridization in 2D Antiferromagnets. *Phys Rev Lett* 124: 147204.

How to cite

SANTOS JUNIOR MS, SALES MO & DE MOURA FABF. 2023. Magnon-lattice propagation in a Morse chain: the role played by the spin-lattice interaction and the initial condition. *An Acad Bras Cienc* 95: e20230408. DOI 10.1590/0001-3765202320230408.

Manuscript received on April 12, 2023;
accepted for publication on August 31, 2023

MARCONI SILVA SANTOS JUNIOR¹

<https://orcid.org/0009-0001-1932-6559>

MESSIAS DE OLIVEIRA SALES²

<https://orcid.org/0000-0001-5116-0301>

FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA¹

<https://orcid.org/0000-0002-4446-0450>

¹Universidade Federal de Alagoas, Instituto de Física, Av. Lourival Melo Mota, s/n, Tabuleiro do Martins, 57072-900 Maceió, AL, Brazil

²Instituto Federal do Maranhão, Campus São João dos Patos, Rua Padre Santiago, s/n, Centro, 65665-000 São João dos Patos, MA, Brazil

Correspondence to: **Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura**

E-mail: fidelis@fis.ufal.br

Author contributions

M.S.S. Junior and F. A. B. F. de Moura did all calculations of the figures; M.O. Sales and F. A. B. F. de Moura written the manuscript.



ANEXO D . Artigo: Transferência do estado
de mágnon em cadeia com desordem
correlacionada.



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

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

Research article

Magnon state transfer in chains with correlated disorder

M.S.S. Junior^a, W.V.P. de Lima^{a,b}, V.A. Teixeira^b, D.B. da Fonseca^b, F. Moraes^b,
A.L.R. Barbosa^b, G.M.A. Almeida^a, F.A.B.F. de Moura^{a,*}^a Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970, Maceio-AL, Brazil^b Departamento de Física, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife-PE, 52171-900, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:

Magnon

Localization

Correlated disorder

Quantum information

ABSTRACT

We investigate a one-dimensional spin-1/2 quantum Heisenberg model with disordered exchange couplings and magnetic fields. The first features a correlated disorder obeying a power law spectrum of the form $S(k) \propto k^{-\beta}$. The magnetic fields are uniformly distributed random values. We numerically investigate the competition between disorder and correlation in a protocol involving the state transfer of a magnon state from one end of the chain to the other. The performance is measured via the transfer fidelity and end-to-end concurrence between spins. We address the conditions for a state transfer protocol to occur with good fidelities even in the presence of disorder.

1. Introduction

The dynamics of spin waves has attracted significant attention over the past decade due to their promising applications in information technology [1]. Spin waves are collective excitations of magnetic moments in magnetic materials. Besides giving birth to rich physics they offer an advantage over standard electronic transport in terms of energy dissipation [2]. Recent experimental works explore the use of magnons to control magnetic domain walls [3], form Bose-Einstein condensates [4], carry out efficient transport [5], and so forth [1].

Given their properties, spin waves also meet applications in quantum information processing [1,6]. Indeed, engineered spin chains have been a standard to the design of quantum-state transfer protocols [7]. Short- to moderate-distance transmission have been shown to be feasible in spin chains with static parameters that run on the natural time evolution of the system. As such, the topological profile of the system is crucial for delivering the desired output [8]. Long-range interacting spin chains have been investigated in [9,10]. In [10] the authors reduced it to an effective, ideal two-spin system which is scalable with the channel while keeping the interaction strength relatively high. Other configurations include staggered spin-1/2 chains [11,12] that display rich topological properties. Many-qubit quantum state transfer has also been explored [13].

There is a variety of configurations one can envisage to precise the speed, fidelity, and robustness of a qubit transfer [7,8,11,13–20]. One particular scheme relies on a minimum engineering of the channel by adjusting only the outer couplings [16,21]. Zwick et al. reported that the weak-coupling regime is quite robust against static disorder [19].

In Ref. [22], the authors showed that an inhomogeneous external field can extend the range of parameters that allows for high-fidelity state transfer in that class of spin chains.

Here we explore a 1D quantum Heisenberg spin-1/2 model featuring disordered exchange couplings and nonuniform magnetic fields. In particular, the spin-spin interaction assumes a correlated disorder distribution with power law spectrum $S(k) \propto k^{-\beta}$, with a tunable exponent β and k being the modulation wave vector. It was showed that correlated disorder can increase the quality of quantum state transfer protocols compared to the uncorrelated case [23]. We thus set out to investigate the interplay between disorder and correlations in a magnon transfer protocol. The magnetic field within the channel takes independent random values uniformly distributed in a given disorder width. At both ends of the chain, the magnetic fields are tunable parameters. These will be responsible for harnessing propagating magnon modes in the spectrum. The quantum state transfer works by preparing a magnon at one side of the chain, and letting it be reconstructed (as much as possible) at the other side via the Hamiltonian time evolution. The quality of the protocol can be measured by the transfer fidelity [7] and end-to-end concurrence [24]. Our results indicate that the presence of correlations in the disordered spin-spin coupling promotes good transfer fidelities under weak magnetic fields.

2. Model and formalism

Let us consider a quantum Heisenberg model with N spin-1/2 particles that reside on a linear chain under the effect of a nonuniform

* Corresponding author.

E-mail address: fidelis@fis.ufal.br (F.A.B.F. de Moura).

magnetic field \vec{H}_n . The Hamiltonian reads [25,26]

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N \{ J_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + \vec{H}_n \cdot \vec{S}_n \}, \quad (1)$$

where J_n are the exchange couplings connecting nearest-neighbor sites. The magnon transfer protocol occurs between the first and last sites of the chain ($n = 1$ and $n = N$) acting as sender and receiver, respectively. The exchange coupling between each of them and the channel (sites 2 through $N - 1$) is set as $J_1 = J_{N-1} = j_0$. Now, the exchange couplings within the channel feature a kind of long-range correlated disorder [27]

$$J_n = \sum_{k=1}^{N/2} k^{-\beta/2} \cos \left(\frac{2\pi n k}{N} + \phi_k \right), \quad (2)$$

with ϕ_k being a random phase uniformly distributed in $[0, 2\pi]$. The series generated by the above formula is associated to the trace of a fractional Brownian motion with power spectrum $S(k) \propto k^{-\beta}$ [25,27].

The exponent β is a tunable parameter to control the degree of correlations. When $\beta = 0$, the couplings J_n are uncorrelated obeying a Gaussian distribution. For $\beta > 0$, long-range correlations set in and modifies the localization profile of the modes. Indeed, in an Anderson model featuring only diagonal disorder it has long been known that when $\beta > 2$, the series increments become persistent and it culminates in a localization–delocalization transition of single-particle eigenstates [27]. For the quantum Heisenberg model with disordered long-range correlated couplings, de Moura et al. [25] reported a mobility edge at the vicinity of $\beta = 1$ [28] separating extended and localized modes.

After generating the series according Eq. (2) we normalize the distribution and further $J_n \rightarrow [0.5 \tanh(J_n) + J]$, where $J \equiv 1$ sets our energy scale. The nonuniform magnetic field within the channel are random numbers uniformly distributed with a disorder width h , that is $H_n \in [-h/2, h/2]$ for $n \neq 1, N$. Here we restrict our analysis to case of weak disorder $h < J$. The magnetic field acting on the outer spins is fixed to $H_1 = H_N = E_{SR}$.

Our computational basis is spanned by magnon states featuring a single reversed spin at a given location n , $|n\rangle = S_n^+ |g\rangle$, where $|g\rangle$ denotes the ferromagnetic ground state. As such, an arbitrary superposition at time t reads $|\phi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle$. The time-dependent Schrödinger equation is written as

$$(J_n + J_{n-1} + 2H_n)f_n - J_n f_{n+1} - J_{n-1} f_{n-1} = 2i\hbar \frac{df_n}{dt}. \quad (3)$$

Therefore, the time evolution of the state is given by ($\hbar = 1$) $|\phi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t} |\psi(0)\rangle$. All we need then is to perform a numerical diagonalization of the Hamiltonian to obtain all eigenvectors $|\psi_j\rangle = \sum_l c_l^j |l\rangle$ and eigenvalues E_j . Expanding the initial state in the eigenstate basis, $|\phi(0)\rangle = \sum_j A_j |\psi_j\rangle$, with $A_j = \sum_l f_l(0) c_l^j$, we get $f_n(t) = \sum_j A_j c_n^j e^{-iE_j t}$.

A single-qubit state can be encoded in the first site of the spin chain by preparing the input $|\phi(0)\rangle = c_0 |g\rangle + c_1 |1\rangle$. The actual state propagation takes place in the one-magnon subspace. Thus, a figure of merit of the protocol must include the transition amplitude to the other end of the chain $f_N(t)$. Indeed, if we average the output fidelity over all possible inputs $\{c_0, c_1\}$ (covering the whole Bloch sphere), we obtain a monotonic function of such a quantity amplitude, the so-called averaged fidelity

$$F(t) = \frac{1}{2} + \frac{|f_N(t)|}{3} \cos \xi + \frac{|f_N(t)|^2}{6}. \quad (4)$$

We set $\cos \xi = 1$ which is equivalent to a proper local rotation at the receiver's site. Such a fidelity ranges between 1/2 and 1.

The role of the tunable outer couplings j_0 is to induce an effective two-level dynamics between the outermost spins [16,21]. It happens when $j_0 \ll J$ and there is enough symmetry within the channel spectrum [8]. In other words, such a configuration can induce a pair of bilocalized eigenstates at both edges of the chain $|\psi^\pm\rangle \approx (|1\rangle \pm |N\rangle) / \sqrt{2}$. If this holds we expect pairwise entanglement to establish in between

Rabi-like cycles. The concurrence [24] between the communicating parties in the single-excitation subspace reads

$$C(t) = 2|f_1(t)f_N(t)|, \quad (5)$$

which goes from 0 (no entanglement) to 1 (maximum entanglement).

In the absence of disorder, weak coupling models deliver quantum state transfer at time $\tau = j_0/\delta\lambda$, where $\delta\lambda$ is the gap between the bilocalized states [8,16,21]. This gap is typically small. A perturbative approach yields $\delta\lambda \propto j_0^2$ [21]. The proportionality constant here is a parameter that depends on the coupling profile of the channel [8]. For a uniform channel, it is simply $1/J$. The disordered spin chain addressed in this work features about the same order of magnitude. But the fluctuations in the spectrum induced by the disorder will affect the transfer time. Therefore, in our simulations we evaluate the maximum fidelity F_{\max} and concurrence C_{\max} in a wide time window up to $tJ = 10^6$ (we shall omit $J \equiv 1$ hereafter). This is more than compatible with the values of j_0 employed here. All those quantities are further averaged over many independent realizations of disorder.

3. Results

We emphasize that the quality of the quantum state transfer depends both on the strength of j_0 and the nature of eigenstates populating the channel spectrum. They are dramatically affected by the exponent β [27]. To address the matter let us analyze the eigenstates of the channel using the function $d(E_j) = N(|a_j| - |b_j|)$ which, for a given eigenvalue E_j , $|a_j|$ and $|b_j|$ represent the maximum and the minimum amplitudes, respectively. For extended states $|a_j| \approx |b_j|$ rendering $d(E_j)$ becomes smaller and roughly independent of N . For localized eigenstates, $d(E_j)$ increases with N . Therefore, using this topological measure we can detect extended modes throughout the spectrum.

By applying exact diagonalization to the disordered channel, we display the function $d = d(E)$ for $\beta = 0, 0.5, 1.5, 3$, and many system sizes in Fig. 1. For now we are taking $h = 0$, i.e., there is no external magnetic field. We can see that when $\beta > 1$ all curves for $E < 1$ collapse to a plateau. That is, the quantity does not depend on N , which is a clear signature of extended magnon modes. For $E > 1$, we observe that $d(E)$ increases with N . This behavior indicates the presence of localized modes. This sharp division is the result of strong long-range correlations that set in as soon as $\beta > 1$ [25,28]. If $\beta < 1$, the system only exhibit extended states in the vicinity of the uniform mode ($E = 0$). Next, we address how a quantum state transfer protocol can take place by harnessing propagating magnon modes.

We are now set to investigate the magnon transfer from one end of the chain to the other. First, it is important that we tune the local magnetic fields of sites 1 and N in resonance with a given energy of the channel spectrum that supports extended states. We choose $E_{SR} = 0.5$ in all simulations below.

In order to evaluate the input-averaged fidelity in Eq. (4), we set an initial state with $f_n(t = 0) = \delta_{n,1}$. Fig. 2 shows a histogram of the maximum fidelity F_{\max} obtained in a time interval $t \in [0, 10^6]$ on a chain with $N = 60$ sites, with the weak coupling $j_0 = 0.01$ and null magnetic field $h = 0$. At this point we want to highlight the role of the long-range correlation alone. Many values of β is considered. When $\beta < 1$, the probability distribution is wide, with high-fidelity transfers being extremely rare. As discussed earlier, this is a consequence of the absence of magnon extended modes around $E = 0.5$. Even if the time evolution fails to deliver $|f_N| \approx 1$ in that case, we point out to the fact that the dynamics is still occurring almost exclusively in the subspace spanned by $|1\rangle$ and $|N\rangle$ [21,23]. Their effective local energies, however, is out of tune due to the spatial profile of localized states and the lack of particle–hole symmetry in the spectrum of the channel [8]. Even with the absence of the disordered magnetic field, the diagonal terms of the Hamiltonian [Eq. (1)] involves a sum of exchange couplings J_n and J_{n-1} , which are correlated random numbers. For $\beta > 1$ in Fig. 2, the performance improves dramatically and even more so when $\beta > 2$.

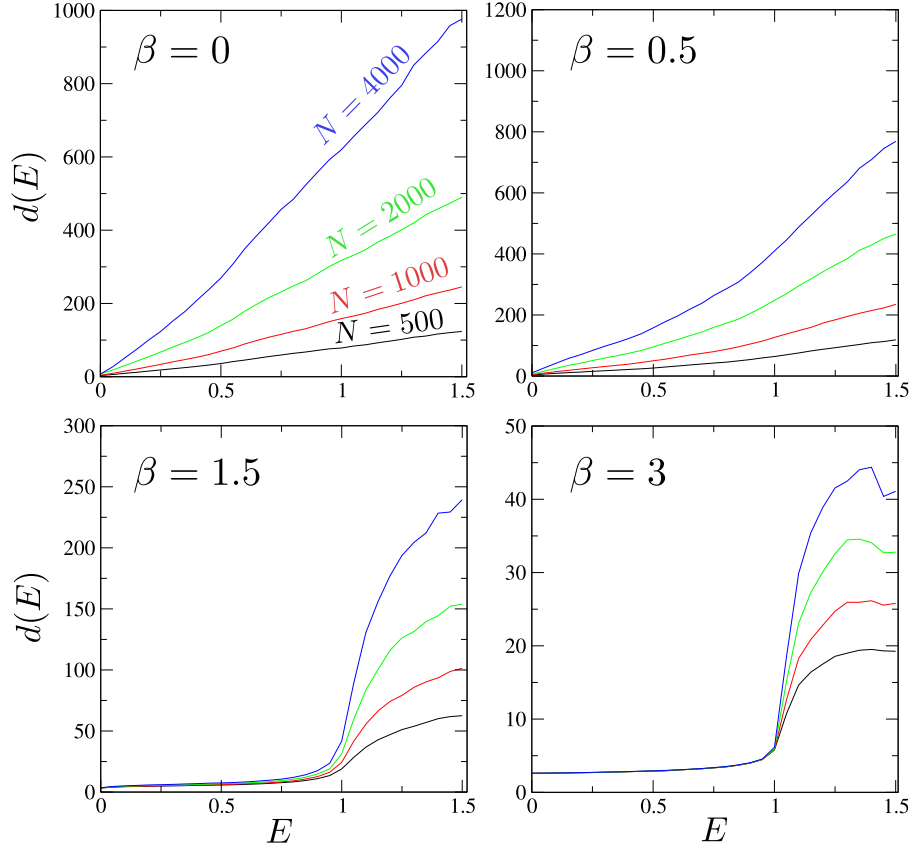


Fig. 1. Function $d(E)$ versus energy E in the absence of the magnetic field ($h = 0$). For a given eigenvalue this quantity reads $d(E_j) = N(|a_j| - |b_j|)$, with $|a_j|$ ($|b_j|$) being the largest (smallest) eigenfunction amplitude. Each panel depicts a different value of the correlation exponent β . Various system sizes are considered and each curve is averaged over 500 distinct disorder realizations.

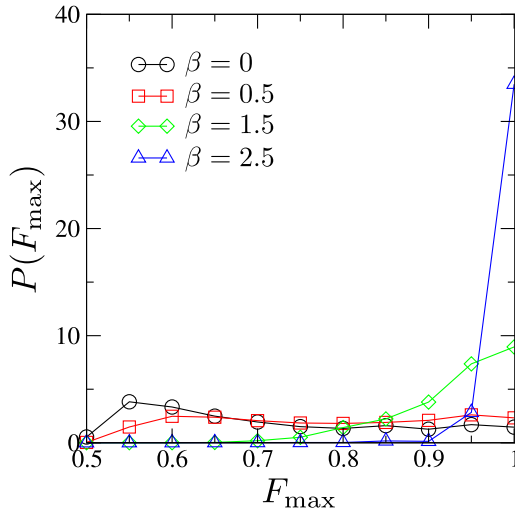


Fig. 2. Probability distribution of the maximum fidelity $P(F_{\max})$ versus F_{\max} . Calculations are done considering $N = 60$, $j_0 = 0.01$, $h = 0$, $E_{SR} = 0.5$ and many values of β . Data are obtained for 3000 independent disorder realizations.

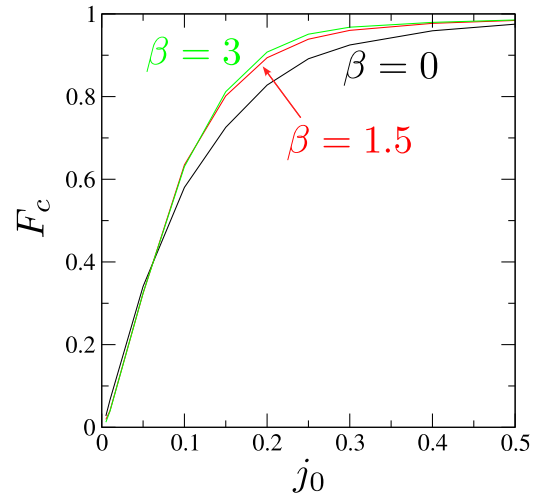


Fig. 3. Total occupation probability of the channel $F_c = \sum_{n=2}^{N-1} |f_n|^2$ versus j_0 for $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $h = 0$, $\beta = 0, 1.5, 3$. Curves are averaged over 3000 independent disorder realizations.

Now, despite the presence of disorder, the vast majority of the samples (about 35% out of 3000 independent disorder realizations) provides fidelities above 0.95.

To see that the channel is barely populated during the realization of the protocol provided that $j_0 \ll 1$, regardless of the outcome fidelity, we evaluate $F_c = \sum_{n=2}^{N-1} |f_n|^2$. This accounts for total occupation probability within the channel. Results are shown in Fig. 3, where we

plot F_c versus j_0 for distinct values of $\beta = 0, 1.5, 3$. We see that the formation of a two-level subspace is not affected by the correlation degree β . But as j_0 increases, the initial delta-located magnon will disperse into the channel. The two-level effective description no longer holds and the quantum state transfer becomes unfeasible. This is shown in Fig. 4 for the same parameters considered before, now including the disordered magnetic field with widths $h = 0.2$ and $h = 0.4$. The decaying trend looks similar in all cases albeit with different scaling

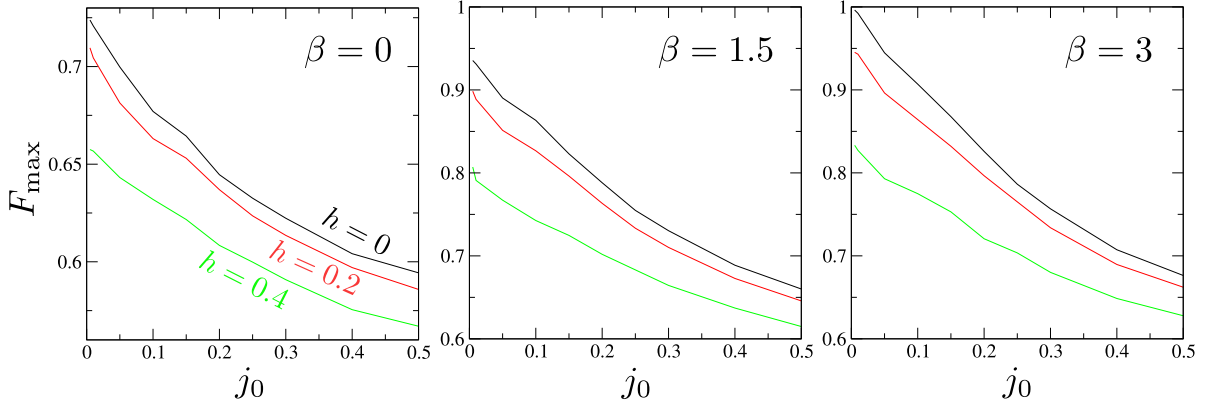


Fig. 4. F_{\max} versus outer weak couplings j_0 for $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $h = 0, 0.2, 0.4$, and $\beta = 0, 1.5, 3$. Curves are averaged over 3000 disorder realizations.

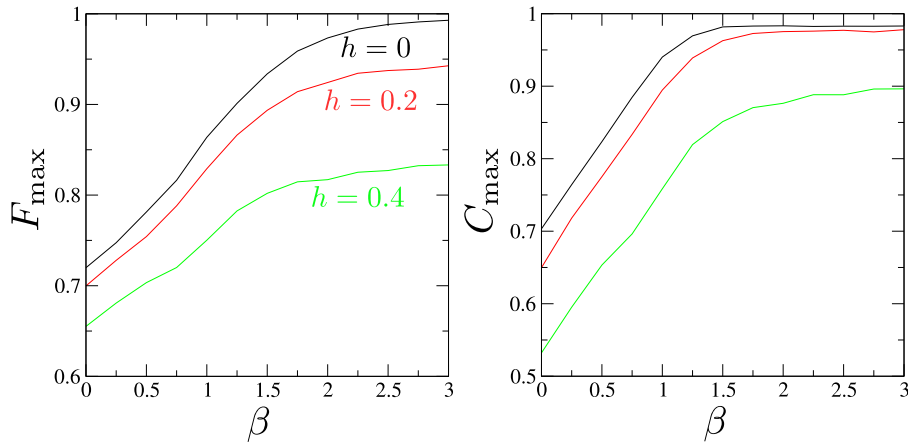


Fig. 5. Maximum fidelity F_{\max} and maximum concurrence C_{\max} versus β for $N = 60$, $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0, 0.2, 0.4$. Both quantities are averaged over 3000 independent disorder realizations.

parameters. We remark that the disordered magnetic field affects the transfer performance more severely, even when β is large.

Fig. 5 shows the dependence of F_{\max} and C_{\max} on β in more detail. It confirms that both quantities are correlated, meaning that bipartite entanglement between the first and last spins eventually builds up with the fidelity. Another interesting detail is that the performance gain induced by the long-range correlations reaches a limit for $\beta > 2$. Such a saturated level is set by the residual uncorrelated disorder due to the magnetic fields. That is, as long-range correlations work out to reduce the local variance [27] of the diagonal terms of the Hamiltonian [Eq. (1)], the uncorrelated series delivered by H_n eventually overcomes. Anderson localization then becomes relevant in the channel spectrum. Yet, it is possible to obtain fidelities higher than the bound corresponding to a classical transmission of a quantum state, $F = 2/3$, even for disorder widths as large as $h = 0.4$.

At last, we analyze how the performance scales with the size of the system N . Fig. 6 shows such a dependence for $N = 60$ up to 160, with fixed $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0.2$, and $\beta = 1.5, 3$. Both the fidelity and concurrence are damaged as N increases. This is due to the fact that j_0 is constant. The number of modes grows with N and so the density of states surrounding the energy level $E = 0.5$ to which sender and receiver spins are tuned. (This does not occur, for instance, in a family of chains that features a topological gap [11].) Still, once again the fidelities obtained for the system sizes considered in Fig. 6 under the influence of the two sources of disorder is higher than the classical threshold $F = 2/3$.

As N increases, if the same level of fidelity (or a greater one) is desired j_0 must be adjusted accordingly. A consequence of reducing j_0 is that the perturbative coupling between the outermost spins responds

$\propto j_0^2$. It ultimately renders the transfer time to increase $\propto j_0^{-2}$. Hence, there is a physical constraint over the system size N . And it should be set in accordance with the desired speed/fidelity of the quantum state transfer protocol.

Quantum state transfer protocols can be seen as engineered quantum walks [29]. As such, the spin Hamiltonian employed here is realizable in devices that allow for a reasonable degree of tuning of the key parameters, namely couplings between adjacent sites and local frequencies. In this regard, photonic waveguide arrays are suitable platforms, with proof-of-principle realizations reported in [30,31] (see also Ref. [32] for a 2D simulations of a quantum walk). In [31] Chapman et al. implemented a perfect quantum state transfer protocol that demands a judicious tuning of all the couplings [15]. Note that the engineering requirements for the system presented here would much less demanding due to disorder, except for the parameters pertaining to the first and last sites. Another potential platform to host a variety of quantum communication protocols and also simulate spin systems is based on arrays of superconducting qubits, as shown recently in [33] for a programmable processor involving 62 qubits.

4. Conclusions

Some degree of disorder is inevitable in spin chains. Therefore, a proper design of solid-state devices to carry out quantum information protocols must take its various forms into account. Here, we have explored a one-dimensional Heisenberg spin-1/2 model as a quantum state transfer channel against the influence of disordered magnetic fields and exchange couplings. The latter features a long-range correlated disorder controlled by a parameter β . The magnetic fields are

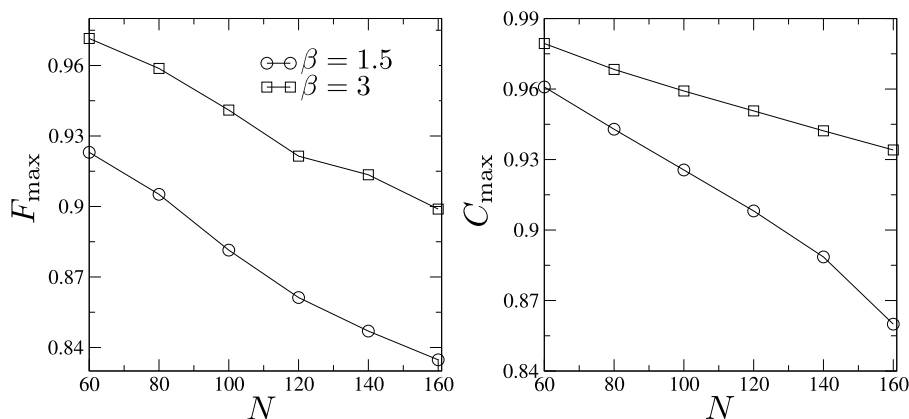


Fig. 6. Maximum fidelity F_{\max} and maximum concurrence C_{\max} versus system size N . System parameters are $E_{SR} = 0.5$, $j_0 = 0.01$, $h = 0.2$, $\beta = 1.5$ and 3 . Curves are averaged over 3000 distinct disorder realizations.

random following a box-like distribution of width h . The competition between these two sources of disorder is crucial in defining the quality of the protocol. The qubit to be transmitted is encoded in a magnon state created on a ferromagnetic ground state. When $h = 0$ and $\beta > 2$, nearly perfect state transfer is achieved. This is possible due to the presence of extended states within the channel [23,27]. Anderson localization is induced upon setting $h \neq 0$, what deteriorates the overall quality of the transfer. However, better-than-classical transmission is still possible for moderate h .

CRedit authorship contribution statement

M.S.S. Junior: Conceptualization, Methodology, Software, Calculations. **W.V.P. de Lima:** Numerical calculations, Validation. **V.A. Teixeira:** Numerical calculations, Validation. **D.B. da Fonseca:** Numerical calculations, Validation. **F. Moraes:** Writing – review & editing. **A.L.R. Barbosa:** Writing – review & editing. **G.M.A. Almeida:** Writing – review & editing. **F.A.B.F. de Moura:** Conceptualization, Methodology, Numerical calculations, Writing – review & editing.

Declaration of competing interest

The authors declare the following financial interests/personal relationships which may be considered as potential competing interests: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura reports financial support was provided by Federal University of Alagoas.

Data availability

Data will be made available on request.

Acknowledgments

This work was supported by CNPq, CNPq-Rede Nanobioestruturas, CAPES, FINEP (Federal Brazilian Agencies), FAPEAL (Alagoas State Agency), and FACEPE (Pernambuco State Agency).

References

- [1] H.Y. Yuan, Y. Cao, A. Kamra, R.A. Duine, P. Yan, *Phys. Rep.* 965 (2022) 1.
- [2] M. Amundsen, I.V. Bobkova, A. Kamra, *Phys. Rev. B* 106 (2022) 144411.
- [3] J. Han, et al., *Science* 366 (2019) 1121.
- [4] B. Divinskiy, et al., *Nat. Commun.* 12 (2021) 6541.
- [5] T. Wimmer, et al., *Phys. Rev. Lett.* 123 (2019) 257201.
- [6] O. Marchukov, et al., *Nat. Commun.* 7 (2016) 13070.
- [7] S. Bose, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 207901.
- [8] G.M.A. Almeida, *Phys. Rev. A* 98 (2018) 012334.
- [9] M. Avellino, A.J. Fisher, S. Bose, *Phys. Rev. A* 74 (2006) 012321.
- [10] G. Gualdi, V. Kostak, I. Marzoli, P. Tombesi, *Phys. Rev. A* 78 (2008) 022325.
- [11] G.M.A. Almeida, F. Ciccarello, T.J.G. Apollaro, A.M.C. Souza, *Phys. Rev. A* 93 (2016) 032310.
- [12] P. Serra, A. Ferrón, O. Osenda, *J. Phys. A* 55 (2022) 405302.
- [13] T.J.G. Apollaro, et al., *Phys. Scr.* 2015 (2015) 014036.
- [14] M.B. Plenio, J. Hartley, J. Eisert, *New J. Phys.* 6 (2004) 36.
- [15] M. Christandl, N. Datta, A. Ekert, A.J. Landahl, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 187902.
- [16] A. Wojcik, T. Luczak, P. Kurzynski, A. Grudka, T. Gdala, M. Bednarska, *Phys. Rev. A* 72 (2005) 034303.
- [17] L. Bianchi, T.J.G. Apollaro, A. Cuccoli, R. Vaia, P. Verrucchi, *New J. Phys.* 13 (2011) 123006.
- [18] G. Gualdi, I. Marzoli, P. Tombesi, *New J. Phys.* 11 (2009) 063038.
- [19] A. Zwick, G.A. Álvarez, J. Stolze, O. Osenda, *Quantum Inf. Comput.* 15 (2015) 582.
- [20] D. Messias, C.V.C. Mendes, G.M.A. Almeida, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *J. Magn. Magn. Mater.* 505 (2020) 166730.
- [21] A. Wojcik, T. Luczak, P. Kurzynski, A. Grudka, T. Gdala, M. Bednarska, *Phys. Rev. A* 75 (2007) 022330.
- [22] G.L. Giorgi, T. Busch, *Phys. Rev. A* 88 (2013) 062309.
- [23] G.M.A. Almeida, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Lett. A* 382 (2018) 1335.
- [24] W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2245.
- [25] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* 66 (2002) 014418.
- [26] Y.A. Kosevich, V.V. Gann, *J. Phys.: Condens. Matter* 25 (2013) 246002.
- [27] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 3735.
- [28] J.P. Santos Pires, N.A. Khan, J.M. Viana Parente Lopes, J.M.B. Lopes dos Santos, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 205148.
- [29] R. Herrman, T.S. Humble, *Phys. Rev. A* 100 (2019) 012306.
- [30] M. Bellec, G.M. Nikolopoulos, S. Tzortzakos, *Opt. Lett.* 37 (2012) 4504.
- [31] R. Chapman, et al., *Nature Commun.* 7 (2016) 11339.
- [32] H. Tang, et al., *Sci. Adv.* 4 (2018) eaat3174.
- [33] M. Gong, et al., *Science* 372 (2021) 948.