

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

THAÍLA FIGUEIREDO ASSUNÇÃO

**ESTUDO DE TRANSPORTE NÃO RECÍPROCO E FUNÇÕES LÓGICAS EM
CADEIAS DISCRETAS ACOPLADAS NÃO LINEARMENTE**

**Maceió
2015**

THAÍLA FIGUEIREDO ASSUNÇÃO

**ESTUDO DE TRANSPORTE NÃO RECÍPROCO E FUNÇÕES LÓGICAS EM
CADEIAS DISCRETAS ACOPLADAS NÃO LINEARMENTE**

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como parte dos créditos para a obtenção do título de Doutor em ciências.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

**Maceió
2015**

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

Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

A851e Assunção, Thaíla Figueiredo.
Estudo de transporte não recíproco e funções lógicas em cadeias discretas acopladas não linearmente / Thaíla Figueiredo Assunção. – 2015.
62 f. : il., grafs.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Dissertação (dissertação em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2015.

Bibliografia: f. 58-62.

1. Sistemas não lineares. 2. Não linearidade. 3. Saturação. 4. Transmissão não recíproca. 5. Porta lógica. 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/FAX 3214-1645

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
TESE DE DOUTORADO

***“Estudo de transporte não recíproco e funções lógicas discretas
acopladas não-linearmente”***

por

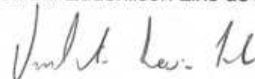
Thaíla Figueiredo Assunção

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Umberto Laino Fulco, do Departamento de Física Teórica e Experimental da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Eudenilson Lins de Albuquerque, do Departamento de Física Teórica e Experimental da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Elton Malta Nascimento, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, e Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram a candidata **aprovada com grau A**.

Maceió, 7 de dezembro de 2015


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Eudenilson Lins de Albuquerque


Prof. Dr. Umberto Laino Fulco


Prof. Dr. Elton Malta Nascimento


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

*Ao Prof. Marcelo Lyra,
por todas as oportunidades e pela paciência*

*Ao meus pais,
por não permitirem que eu desistisse*

*À Diorge,
pelo amor e compreensão*

AGRADECIMENTOS

Nos últimos quatro anos, incontáveis pessoas torceram pelo meu sucesso neste trabalho e tenho por todas elas um grande carinho e gratidão. Aqui encerra-se um período de grande desafio e aprendizado o qual só foi possível porque pude contar o apoio e compreensão de pessoas que acreditaram em mim. Gostaria de destacar aqui a minha eterna gratidão

Ao Professor Marcelo Lyra, pela infinita paciência e compreensão, por acreditar, mesmo quando nem eu acreditei, pelas inúmeras oportunidades que me ofereceu, pela orientação e por o todo o conhecimento que comigo compartilhou. Não existe palavras que expressem o meu sentimento de gratidão;

Aos meu pais, que mais uma vez foram o meu pilar de sustentação, o meu apoio e que me carregaram quando eu já não mais tinha força;

À Diorge pelo carinho e compreensão nos inúmeros momentos de ausência e desequilíbrio. Sei que torceu muito por mim;

À Geovana e Samuel, Rosa e Ítalo pela amizade, pelo carinho e por tantos momentos compartilhados;

Ao Professor Elton pela ajuda, principalmente na fase inicial do Doutorado, o qual foi muito importante para realização deste trabalho;

Ao professor Francisco Fidelis pelo incentivo para realização do doutorado;

À todos os professores do IF pelos ensinamentos;

Aos colegas, especialmente os que dividiram sala comigo, pelos momentos de descontração;

À Capes pelo apoio financeiro.

*Insanidade é continuar fazendo sempre a
mesma coisa e esperar resultados diferentes*
(Albert Einstein)

RESUMO

Sistemas que apresentam transmissão não recíproca ou que possam ser usados em funções lógicas são de grande interesse para a construção de dispositivos essenciais ao desenvolvimento da nanotecnologia. Neste trabalho, investigamos as propriedades de transmissão em duas configurações de cadeias quase unidimensionais, discretas e não lineares. Em uma delas foi explorado o comportamento tipo diodo, e na outra, o surgimento de diferentes tipos de portas lógicas. Ambos os sistemas foram modelados através de um conjunto de equações de Schrödinger discretas não lineares dentro de aproximação tight binding e obtidos seus respectivos espectros de transmissão. O primeiro sistema consiste em um dímero não linear acoplado a duas cadeias lineares no qual investigamos a influência da saturação da resposta não linear na obtenção de transmissão não recíproca, até então ainda não estudada. Através da análise do espectro de transmissão, pudemos mostrar que nas regiões de comportamento biestável (chamados de janelas de biestabilidade), a diferença entre o transporte da direita para esquerda e o transporte da esquerda para direita é mais pronunciada a medida que se aumenta o coeficiente de saturação da não linearidade. Estas janelas se ampliam e são deslocadas para regiões onde a amplitude das ondas incidentes são maiores. O cálculo do fator de retificação nos permitiu mostrar ainda que a influência da saturação se dá de maneira diferente nas janelas de biestabilidade. Enquanto na segunda janela o comportamento é diferente em pequeno e grande comprimento de onda, na primeira isso não ocorre. Portanto, pudemos concluir que valores intermediários da saturação favorecem o transporte unidirecional. O segundo sistema consiste de uma estrutura tipo Y, na qual três cadeias lineares são unidas por um sítio não linear. Esse tipo de estrutura tem sido muito investigado em nanoestruturas de DNA. Investigamos a capacidade deste sistema realizar operações de portas lógicas baseadas na transmissão de ondas incidentes com diferença de fase. Usando um esquema de digitalização do sinal de saída baseado na modulação da amplitude, mostramos que portas AND, OR, e XOR podem ser encontradas. A diferença de fase entre as ondas incidentes é responsável pela existência das portas tipo OR enquanto que fortes não linearidades favorecem a realização de portas lógicas na região de pequeno vetor de onda. A análise do contraste, grandeza que mede a eficiência da porta lógica, mostrou que portas lógicas AND e OR são melhores quando os sítios regulares e o de acoplamento são distintos apenas pela resposta não linear. Concluímos que estruturas tipo Y têm grande potencial para realização de portas lógicas.

Palavras-chave: Não linearidade. Saturação. Transmissão não-recíproca. Porta Lógica.

ABSTRACT

Systems which exhibit nonreciprocal transmission or that can be used as logic functions are of great interest for the development of essential devices to nanotechnology. In this work, we investigate the transmission properties for two kinds of coupled discrete nonlinear chains configurations. In the first structure, it was explored the diode-like behavior, while in the other, it was showed the performance of different logic gates. The two systems were described by a set of the discrete nonlinear Schrödinger equations within a tight-binding approach. We determine their respective transmission spectrum. The first system is a nonlinear dimer coupled to linear side chains. We investigate the influence of the saturation of the nonlinear response on the nonreciprocal transmission, which had not been well studied in the previous literature. Through the analysis of the transmission spectrum, we unveil that, in regions of bistable behavior (windows), the difference between transport from right to left and transport from left to right is greater. Moreover these windows widen and displace to regions where the incident amplitude is larger as saturation is considered. The calculation of rectifying factor showed that, in the second bistability window, the influence of the saturation parameter has distinct actions over short- and long-wavelength. In the first window, the rectifying action is not compromised by the saturation. So weak saturation can improve the efficiency of the nonreciprocal transmission. The second system is a Y-shaped structure, on which three linear chains are joined by a nonlinear site. This kind of structure has been studied in the context of DNA-based devices. We investigated the capability of our model system to perform logic gate operations based on the transmission of phase-shifted incoming waves. Using a digitalization scheme of the output signal based on amplitude modulation, we show that AND, OR and XOR logic gate can be achieved. The phase-shifting between the incoming waves is required for the OR logic gate to be realizable and strong nonlinearity favors the existence of logic gates in the regime of short wavevectors. The analysis of the contrast ratio shows that optimal operation of the AND and OR logic gates takes place when the nonlinear response is the predominant physical property distinguishing the coupling and regular sites. We concluded that Y-shaped structures can potentially perform distinct logic functions.

Keywords: Nonlinearity. Saturation. Nonreciprocal transmission. Logic Gates.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	DIODOS E PORTAS LÓGICAS	14
2.1	Transporte não recíproco: Diodos	14
2.1.1	Diodo elétrico	16
2.1.2	Diodo Óptico	18
2.1.3	Diodo Térmico	19
2.1.4	Diodo Acústico.	22
2.2	Portas Lógicas	25
2.2.1	Portas Lógicas Eletrônicas	25
2.2.2	Outras portas lógicas	28
3	Modelo tight-binding de cadeias discretas com defeito não-linear	32
3.1	Modelo de Bloch	32
3.2	Método Tight-Binding	35
3.3	Coefficiente de transmissão.	37
4	Influência da saturação da não linearidade no transporte não recíproco	43
4.1	Modelo	44
4.2	Biestabilidade e saturação da resposta não linear	46
4.3	Efeito de saturação na ação de retificação	51
5	Portas Lógicas controladas por mudança de fase em cadeias não lineares	56
5.1	Modelo	57
5.2	Resultados e Discussões	59
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVA	67

SUMÁRIO	8
REFERÊNCIAS	69
A ANEXOS	77

1

INTRODUÇÃO

Muitos fenômenos complexos e interessantes encontrados na natureza são devidos a efeitos não-lineares. O estudo destes sistemas tem mostrado uma vasta variedade de fenomenologias e investigá-las constitui um desafio que motiva estudos em diversas áreas da Física, como fonônica, fotônica e biofísica, permitindo que estes sistemas sejam melhor compreendidos, manipulados e controlados afim de desenvolver novos materiais e tecnologias. [1].

Um sistema é dito não-linear se seu sinal de saída não for proporcional ao sinal de entrada. Este comportamento é comum para a maioria das situações no limite de entradas suficientemente grandes. Por exemplo, a oscilação de uma mola torna-se não-linear se o seu deslocamento for grande, ou ainda, um pêndulo é linear apenas se o seu deslocamento angular for pequeno, regime no qual seu período de oscilação não depende de sua amplitude (máximo deslocamento angular) [2].

Matematicamente, um sistema é dito não-linear quando a combinação de suas soluções não é uma solução, ou seja, não é válido o princípio de superposição. Isso torna o tratamento dos mesmos altamente não trivial e tem nos computadores uma importante ferramenta para obtenção de suas soluções. Este fato limitou a abordagem de fenômenos não-lineares, os quais ficaram, por muitas décadas, restritos ao tratamento perturbativo da solução de problemas lineares. No entanto, o desenvolvimento tecnológico e o surgimento de computadores mais potentes mostraram que muitos fenômenos não-lineares não podiam ser previstos via teoria de perturbação [3, 4]. Desta maneira, novas abordagens foram desenvolvidas e importantes descobertas puderam ser feitas, principalmente em relação à transmissão em sistemas não-lineares [2].

Os fenômenos de transporte são problemas fundamentais na Física e, portanto, extensivamente investigados principalmente devido à sua relevância no desenvolvimento de dispositivos tecnológicos relacionados à computação e ao processamento de informação como os diodos, os transistores e as portas-lógicas. Estes dispositivos são a base para o desenvolvimento de microprocessadores. Mais recentemente, estes fenômenos têm sido explorados em estruturas moleculares, com destaque para os componentes bio-eletrônicos [5, 6]. Desta maneira, enten-

der como a não-linearidade afeta a propagação de onda nos diferentes contextos é de extrema importância e tem motivado muitos trabalhos.

No contexto de sistemas ópticos, a polarização induzida no meio dielétrico torna-se uma função não-linear na presença de campos intensos [7]. Juntamente com características dispersivas do meio, a não-linearidade favorece a formação dos sólitons [8], os quais tem um importante papel no desenvolvimento da comunicação totalmente óptica. Já em sistemas eletrônicos, os efeitos não-lineares surgem pela interação dos elétrons com os fônons da rede e isso pode levar a uma autolocalização do elétron, que dá origem aos modos localizados intrínsecos (breathers) [9, 10], úteis para o desenvolvimento de dispositivos lógicos e de chaveamento (switching), além de permitir entender melhor o transporte de cargas em biomoléculas. Algumas moléculas ou compostos orgânicos tem sido identificados com forte resposta não-linear [11].

O desenvolvimento de tecnologias digitais usadas em computadores e outros dispositivos eletrônicos para transmissão, processamento e armazenamento de informações requerem cada vez mais componentes menores e com maior velocidade de processamento e memória. No entanto, os dispositivos de semicondutores tradicionais (geralmente baseados em silício) possuem barreiras físicas que limitam esse aumento de performance e redução do tamanho. Por isso há um considerável interesse no desenvolvimento de novos materiais que possam vir a substituir estes semicondutores na fabricação de dispositivos nanotecnológicos. Junções de nanotubos de carbonos tem mostrado importantes propriedades para avanços nessa área, com capacidade de retificação, comportamento de comutação e uso como componente lógico [12–14]. Outra possibilidade que também tem se mostrado bastante viável neste contexto é o uso de biomoléculas como por exemplo oligopeptídeos, proteínas, RNA e DNA citeendres2004colloquium, waleed2010electrical, church2012next, oliveira2014electronic, albuquerque2014dna.

A principal vantagem do uso de biomoléculas, com destaque para o DNA, é a necessidade de baixa corrente e potência de operação, fabricação mais simples e barata, versatilidade no seu uso e flexibilidade mecânica, o que permite a esses dispositivos serem incorporados em estruturas flexíveis. Sua principal desvantagem é seu pequeno tempo de vida devido a degradação e o fato de serem muito reativas com água e outras substâncias [15]. DNA é um exemplo de sistema no qual os efeitos não-lineares são essenciais e tem motivado estudos fundamentais de dinâmica não-linear, de modo que se busca desenvolver diversas abordagens que modelem aspectos de sua dinâmica e possam ser exploradas no desenvolvimento de dispositivos biomoleculares [16].

É importante destacar que o uso de biomateriais é interessante não apenas por uma questão de substituição dos eletrônicos convencionais, mas também pela possibilidade de uma ação complementar entre os mesmos. Este fato abre caminho para aplicações mais diversificadas que não apenas a miniaturização dos circuitos eletrônicos. A conexão dos eletrônicos tradicionais com tecidos biológicos permite a criação de chips neurais, implantes, próteses, dispositivos capazes de aumentar ou estender as capacidades do corpo humano, entre outras possibilida-

des [15, 17].

Nesse cenário de computação e processamento de informação em nanoescala, diodos e portas lógicas são dispositivos essenciais na construção de circuitos integrados, por isso é grande o interesse em investigar as possibilidades de obtenção destes componentes dentro deste novo contexto de desenvolvimento nanotecnológico. Um pouco mais sobre eles será tratado nas sessões a seguir.

Transporte não-recíproco

Dispositivos retificadores e comutadores são componentes fundamentais usados para controlar fluxo de energia, massa e informação em inúmeras aplicações. A invenção de dispositivos que controlam a condução elétrica, como os diodos e os transistores, marcou o surgimento da eletrônica moderna. Motivados pela capacidade de retificação dos diodos elétricos, muitas contribuições têm se dedicado a investigar a possibilidade de assimetria no transporte de outras formas de energia, como térmica [18–20], óptica [21–23] e acústica [24–27].

É sabido que estruturas lineares que preservam a simetria de reversão do tempo não são capazes de quebrar a reciprocidade na reflexão e transmissão. Portanto, a transmissão ocorre igualmente em ambas as direções [28, 29]. Existem diversas maneiras de conseguir transporte unidirecional, como por exemplo usando materiais magneto-ópticos, estruturas ópticas variáveis no tempo, ou ainda em meios discretos com a introdução de não-linearidade e defeitos [23]. Na óptica, por exemplo, este efeito tem sido alcançado pelo efeito Faraday, onde um campo magnético externo é usado para quebrar a simetria espaço-tempo. No entanto, este procedimento requer dispositivos grandes, o que vai na contra mão da necessidade de miniaturização dos chips. Para encontrar não-reciprocidade sem depender da efeitos magneto-ópticos é necessário ter efeitos não-lineares e quebra de simetria. [30, 31]. Sendo assim, uma opção que tem se mostrado vantajosa é o uso de estruturas não-lineares assimétricas.

Recentemente, uma pronunciada diferença entre a transmissão da direita para esquerda e da esquerda para direita foi obtida em sistema de camadas assimétricas não-lineares [32], bem como para um sistema discreto não-linear com assimetria geométrica da cadeia [28]. A influência de assimetria também tem sido investigada sobre as propriedades de condução de nanofitas de grafeno para viabilização do seu uso como dispositivos retificadores [33].

Portas Lógicas

Além dos dispositivos de retificação, os dispositivos de controle lógico, como as portas lógicas são importantes para o desenvolvimento de nanocircuitos.

Portas lógicas são dispositivos que podem realizar operações lógicas pela transformação de um ou mais sinais de entrada em uma saída única e definida. Constituem componentes fundamentais dos sistemas digitais e baseiam-se no princípio de lógica Booleana, ou seja, os sinais de entrada e saída possuem valores lógicos “0” ou “1” [34].

A combinação de dois sinais de entradas (podem ser 1 ou 0) resultam em respostas que caracterizam os três tipos básicos de porta lógica, são elas NOT, AND e OR, sendo as demais (XOR, XNOR, INH, NOR etc) obtidas pela combinação dessas três.

Por sua importância no processamento de informação, comunicação e computação, o estudo de portas lógicas tem recebido muita atenção principalmente no que se reporta ao descobrimento de novas estruturas para realização das mesmas. Com destaque para o interesse em dispositivos totalmente ópticos e moleculares.

Dispositivos totalmente ópticos apresentam-se mais rápidos, compactos, com maior capacidade de fluxo de informação e menor potência de consumo quando comparados aos dispositivos eletrônicos. Por isso, alguns esquemas de portas lógicas têm sido reportados usando efeitos não-lineares em fibras acopladas [35–38] e em cristais fotônicos [39–41]. Portas lógicas em cristais fotônicos são apontadas com grande potencial para serem utilizadas como componentes chave em circuitos integrados no futuro por sua simplicidade de construção, tamanho ultracompacto, e ausência de controle externo do campo [39]. Recentemente, estruturas modeladas em forma de Y tem sido investigadas para obtenção de portas tipo XOR e tipo AND, respectivamente em [40, 42].

Por outro lado, o avanço da computação molecular e miniaturização dos componentes eletrônicos também estimulam o desenvolvimento de funções lógicas em moléculas, com destaque para aquelas em DNA [43–45]. A integração de portas lógicas em estruturas mais complexas oferece diversas possibilidades de controlar operações para aplicação em biosensores. Por exemplo, combinação de portas lógicas baseadas em DNA podem ser usadas para detectar e responder apenas perfis específicos de miRNA, sinalizando assim diferentes tipos de cancer [46]. Estudos de junções de DNA na forma de Y (Y-DNA) tem se mostrado essencial na construção de funções lógicas [47, 48], sendo investigadas como meio de concatenar portas lógicas para operar em bio-computação [49]. Combinadas com FRET (Förster resonance energy transfer) é possível implementar funções INHIBIT e OR [50].

Junções em forma de Y em nanotubos de carbono também têm se mostrado como opções para um novo tipo de dispositivo lógico [51]. Junto com suas propriedades condutoras, estas junções têm mostrado comportamento único de comutação que favorece seu uso como substituto dos dispositivos convencionais. Uma modulação abrupta da corrente do estado ON para OFF tem sido observada nestas estruturas favorecendo a realização de portas AND [14].

Pelo que foi apresentado acima, é possível notar que o estudo de transporte em sistemas ópticos, em moléculas de DNA e em nanotubos de carbono estimulam uma série de trabalhos que

investigam as possibilidades de aplicações em nanodispositivos com destaque para as propriedades de transporte não-recíproco e desenvolvimento de funções lógicas. Portanto, pesquisas visando projetar novas estruturas que possam contribuir neste contexto são grande interesse. Uma forma de modelar esses sistemas é através de cadeias discretas quase unidimensionais. A investigação das propriedades de transporte não-linear através destas cadeias fornece relevantes informações para aplicações no desenvolvimento destes dispositivos.

Como já foi dito, os efeitos da não-linearidade são responsáveis por importantes características na transmissão de um sistema. No entanto estes efeitos não aumentam infinitamente. Existe um limite acima do qual o sistema retoma um comportamento linear. Isso acontece porque a contribuição dos termos de mais alta-ordem da susceptibilidade decresce, de modo que há a saturação dos efeitos não-lineares. Essa saturação pode resultar em efeitos não triviais sobre as propriedades de transporte [52–55]. Seu impacto no transporte não-recíproco de cadeias não-lineares e assimétricas ainda não está bem estabelecido na literatura especializada.

Desta maneira, interessados em investigar as propriedades não-lineares de transporte em sistemas quasi unidimensionais discretos na forma de cadeias semi-infinitas, vamos modelar nosso sistema usando um conjunto de equações de Schrödinger discretas e não-lineares dentro de uma aproximação tight-binding. Nesta tese, iremos abordar duas das questões centrais discutidas neste capítulo. Inicialmente, iremos estudar a influência da saturação da não-linearidade no transporte não-recíproco em um dímero assimétrico, explorando a sua capacidade de aplicação como dispositivos tipo diodo. Usando a mesma metodologia, analisaremos ainda as possibilidades de junções não-lineares de cadeias discretas efetuarem operações lógicas a partir da transmissão de ondas com diferença de fase.

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2 será feita uma revisão do estado da arte desta linha de pesquisa, discutindo os principais trabalhos que nos motivaram. Além desta revisão, ofereceremos uma abordagem mais detalhada sobre o funcionamento dos diodos e porta lógicas num cenário geral. No capítulo 3 será feita uma revisão da metodologia necessária para o desenvolvimento de nossos modelos. No capítulo 4 investigaremos a influência da saturação da não-linearidade no comportamento tipo diodo de um dímero assimétrico, mostrando que fraca saturação favorece o efeito diodo, tendo o sistema elevada transmissão e ainda, mostrando que o papel da saturação é diferente para pequenos e grandes comprimento de onda. No capítulo 5, exploraremos a capacidade de uma junção na forma de Y de realizar operações lógicas baseadas na transmissão de ondas harmônicas com diferença de fase. Mostramos que esta configuração permite a formação de portas do AND, XOR e OR. Esta última só é possível devido a existência da diferença de fase. Enquanto que a presença de não linearidade favorece a realização de portas no regime de pequenos vetores de onda. Foi demonstrado também que a eficiência das portas AND e OR são maiores quando a não linearidade é o efeito físico predominante no sistema. Por fim, no capítulo seguinte, apresentaremos nossas conclusões e perspectivas.

2

DIODOS E PORTAS LÓGICAS

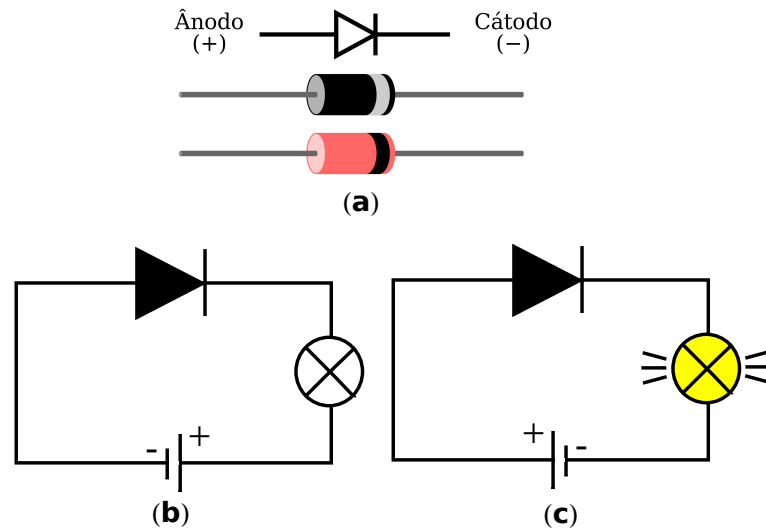
A habilidade para controlar dinamicamente a transmissão de energia permite o desenvolvimento de novos materiais e dispositivos, como os diodos e as portas lógicas, os quais são fundamentais em circuitos de computação, informação, comunicação e sistemas biológicos, imprescindíveis no contexto da vida atual. Devido à crescente necessidade de desenvolvimento nanotecnológico que acompanhe as demandas atuais de armazenamento, velocidade e processamento, muita atenção vem sendo dada às pesquisas de novos designs e abordagens teóricas que possam prever o comportamento de tais dispositivos em novos contextos (além do eletrônico, já tão conhecido) como brevemente apresentado na introdução.

Sendo assim, neste capítulo serão investigados os mecanismos necessários para compreensão do funcionamento dos diodos e portas lógicas tanto no cenário eletrônico quanto na extensão do conceito para aplicação em fotônica, fonônica e sistemas biomoleculares. Inicialmente, na primeira seção, será abordado o que é transporte assimétrico e como ele pode ser obtido para realização de diodos elétrico, óptico, térmico e acústico, mostrando alguns dos principais trabalhos propostos até aqui. Na seção seguinte, será discutido o conceito de funções lógicas e sua aplicação, principalmente na construção de circuitos moleculares.

2.1 Transporte não recíproco: Diodos

Em meios unidimensionais, lineares e com simetria de reversão do tempo, a propagação de onda é recíproca [29]. Isso significa que o coeficiente de reflexão (transmissão) é o mesmo quando a onda incidente muda de sentido. Embora esse comportamento esteja presente em uma grande quantidade de sistemas, há um crescente interesse pela investigação do transporte não recíproco, isto é, em meios onde os coeficientes de transmissão e reflexão mudam de acordo com o sentido de propagação da onda incidente. Esse interesse se dá, principalmente, porque transporte assimétrico (não recíproco) é o princípio básico do funcionamento dos diodos, dis-

Figura 2.1: (a) Símbolo e esquema de um diodo real. (b) Esquema de diodo em polarização inversa. Não há passagem de corrente elétrica. (c) Esquema de diodo em polarização direta. Há passagem de corrente.



Fonte: Imagem adaptada da referência [57]

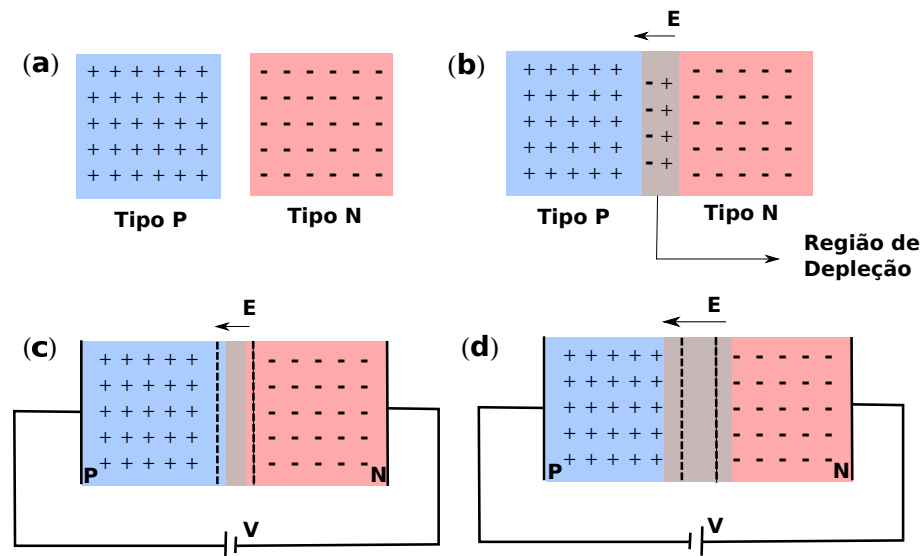
positivos com habilidade para controlar o fluxo de energia que são a base para desenvolvimento de transistores e portas lógicas, essenciais em circuitos integrados.

Para criar dispositivos que permitam esse tipo de transmissão é necessário quebrar a reciprocidade do sistema. De acordo com Maznev et al [27], essa quebra se dá quando é violada a simetria de reversão do tempo ou a linearidade do sistema. Em outras palavras, para se obter o efeito diodo é preciso que ocorra quebra de simetria de paridade (P) ou reversão do tempo (T) ou de ambos (PT) [56]. É importante destacar que quebrar simetria de reversão temporal é muito mais difícil do que quebrar simetria de paridade, deste modo, muitos trabalhos tem explorado a combinação de não linearidade e estruturas assimétricas como melhor forma de se obter transporte assimétrico.

O primeiro diodo foi proposto no campo da eletrônica, com o desenvolvimento de dispositivos que controlam o fluxo de corrente elétrica a partir da junção de dois semicondutores diferentemente dopados. O sucesso deste dispositivo foi tão importante para o desenvolvimento da área que atualmente busca-se obter dispositivos análogos usando luz, calor e ondas sonoras, todos com grande potencial de aplicação na produção de nanotecnologias.

Uma vez que o grande desafio é saber como quebrar a simetria do sistema para obter transmissão assimétrica e que obedeça as necessidades de tamanho, custo e praticidade do dispositivo proposto, muitos trabalhos tem investigado e testado diferentes designs. A seguir será apresentado o principio de funcionamento do diodo eletrônico e em seguida, serão mostradas algumas das principais abordagens para se obter diodos ópticos, térmicos e acústicos disponíveis até o momento.

Figura 2.2: Esquema de funcionamento do diodo semiconductor. (a) Semicondutores dopados tipo P (excesso de portadores de carga positiva) e tipo N (excesso de portadores de carga negativa). (b) Junção dos semicondutores dopados. Alguns portadores de carga localizados próximos a ambos os lados da junção se combinam gerando um campo elétrico que impede que o mesmo ocorra com os outros portadores formando a chamada região de depleção. (c) Quando a junção é colocada em polarização direta, a região de depleção reduz, permitindo que os portadores de carga dos semicondutores tenham energia suficiente para atravessá-la e portanto há passagem de corrente elétrica através do diodo. (d) Quando a junção é colocada em polarização inversa, a região de depleção aumenta e não é possível o transporte de carga através da junção. Logo, não passa corrente pelo diodo.



Fonte: Autor, 2015

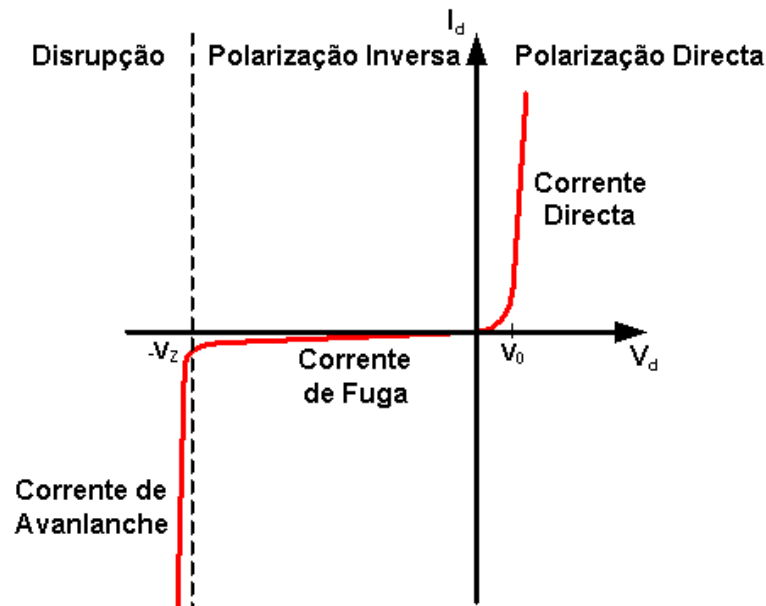
2.1.1 Diodo elétrico

Como já foi mencionado, os diodos são dispositivos essenciais em circuitos digitais. Baseiam-se na dependência do coeficiente de transmissão com a direção de propagação da onda, ou seja, tais dispositivos comportam-se como condutores em uma direção, mas não o são (ou são menos condutores) na direção oposta, de modo que a passagem de corrente se dá, preferencialmente, em uma única direção.

O tipo de diodo mais conhecido é o que controla fluxo de corrente elétrica, os chamados diodos semicondutores. Estes comportam-se como condutores ou isolantes elétricos dependendo da forma como a tensão é aplicada em seus terminais (veja figura 2.1). Entre as muitas aplicações destes dispositivos, eles podem ser usados para transformar corrente alternada em corrente contínua, bem como amplificador, chaveador de corrente e operação de funções lógicas.

O diodo semiconductor é formado pela junção de dois semicondutores (geralmente Ge ou Si), um dopado positivamente (tipo P), isto é, possuindo excesso de buracos, é o ânodo e outro dopado negativamente (tipo N), ou seja, possuindo excesso de elétrons, é o cátodo (veja figura 2.2(a)). Na região onde os semicondutores se encontram ocorre uma combinação entre os

Figura 2.3: Curva característica do comportamento do diodo em polarização direta e inversa.



Fonte: Imagem extraída da referência [57]

portadores de carga positiva, buracos, e os portadores de cargas negativas, elétrons, de maneira que não haverá portadores de carga livres nesta região, chamada de região de depleção, como mostrado na figura 2.2(b). Portanto, imediatamente após a junção um campo elétrico é formado nesta região, impedindo que transporte de portadores através da junção não polarizada continue. Quando o diodo é submetido a uma polarização direta, isto é, quando o lado P é submetido a um potencial positivo relativo ao lado N do diodo, ocorre uma redução da região de depleção, pois o polo positivo da fonte repele os portadores de cargas positivos do lado P e o polo negativo repele os elétrons do lado N. Deste modo os elétrons e lacunas tem energia suficiente para atravessar a barreira e assim a corrente elétrica pode fluir através do diodo (figura 2.2(c)).

Porém quando o diodo é submetido a uma polarização inversa, isto é, o lado N fica submetido a um potencial positivo relativo ao lado P, então os polos atraem os portadores livres de cada lado da junção, aumentando a região de depleção e dificultando o fluxo através da junção (figura 2.2(d)). Como resultado, a corrente que passa pelo diodo é nula (ou praticamente nula).

A figura 2.3 mostra a curva características do comportamento do diodo em polarização direta e inversa. Note que o bloqueio da corrente elétrica no diodo em polarização inversa pode não ser total, resultando na chamada corrente de fuga. Isso ocorre quando não se trata de um diodo ideal. Além disso, quando operando em tensão inversa, o diodo possui uma tensão máxima acima da qual ele permite passagem de corrente.

Influenciado pelo impacto do diodo elétrico na indústria eletrônica, grande atenção tem sido dada às pesquisas de retificação de outros processos de transporte, explorando a capacidade de manipular fótons e fônons, similarmente ao que é feito com elétrons.

2.1.2 Diodo Óptico

O desenvolvimento de materiais e dispositivos que controlam fótons possibilitou uma revolução nas redes de comunicação e processamento de informação por meio do uso de fibras ópticas, micro-ondas e comunicação sem fio, entre outros.

Um dispositivo óptico capaz de transmissão unidirecional, análogo ao diodo eletrônico, tem grande aplicação em processamento de informação e comunicação ópticas. Existe uma variedade de maneiras de se obter efeito diodo em sistemas ópticos. Geralmente é obtido pela quebra de simetria de reversão temporal usando campo magnético em meios lineares [58–60] ou explorando interações não lineares [21, 61–63]. O objetivo deste trabalho será conhecer melhor as abordagens baseadas em estruturas não lineares assimétricas.

Cristais fotônicos (PhC ¹) são estruturas formadas pela superposição de finas camadas de materiais dielétricos as quais, posicionadas de maneira periódica, apresentam um espectro de transmissão semelhante ao de um cristal atômico, com faixas de frequências transmissíveis e outras onde não existem modos propagantes (os chamados band-gaps fotônicos-PBG ²) [64]. Isso faz com que o PhC apresente propriedades de condução da luz análogas às dos semicondutores no transporte de elétrons e, portanto, demonstra grande potencial para aplicação como base para dispositivos fotônicos integrados [65].

Substituindo elétrons relativamente lentos por fótons como carregadores de informação, a velocidade e a largura de banda de sistemas de comunicação avançados podem ser dramaticamente aumentados, o que vem promovendo uma revolução na indústria de telecomunicação [66].

A combinação de PhC assimétricos e não linearidade demonstra alta capacidade de transmissão unidirecional e, portanto, constituem um bom sistema para construção de diodos ópticos com pequeno tamanho e alta eficiência. Um outro ponto que também torna estas estruturas interessantes para desenvolvimento de dispositivos é por serem de simples modelagem e fabricação. Deste modo, diversos trabalhos têm investigado diferentes modelos de estruturas assimétricas em cristais fotônicos assimétricos que possam ser usadas para obter comportamento tipo diodo, por exemplo, baseados em mudança gradual dos índices de refração, ou defeitos localizados assimetricamente no PhC, ou estruturas de quase-cristais, entre outras maneiras [63, 66–68].

Deste modo, a ação tipo diodo baseada em multicamadas fotônicas não lineares depende de duas condições: forte não linearidade para garantir estados de alta transmissividade, os quais são mais sensíveis à variação de parâmetros, e assimetria espacial que garante que os modos ressonantes sejam mais fortemente acoplados para um lado do que para outro. Isso causa uma mudança no índice de refração dependente da direção devido a não linearidade de Kerr [63].

¹Sigla derivada do inglês Photonic Crystal

²Sigla referente ao termo em inglês Photonic Band Gap

A primeira proposta para diodo totalmente óptico baseado em PhC foi sugerida por Solora *et al.* [61, 62]. Os autores investigaram a propagação de onda em uma estrutura constituída por camadas alternadas de materiais lineares e não lineares. A assimetria foi obtida pela variação gradativa do índice de refração do meio linear. Eles mostraram que a propagação não recíproca acontece devido à redução do band gap fotônico dependendo da não linearidade e da direção de propagação da luz.

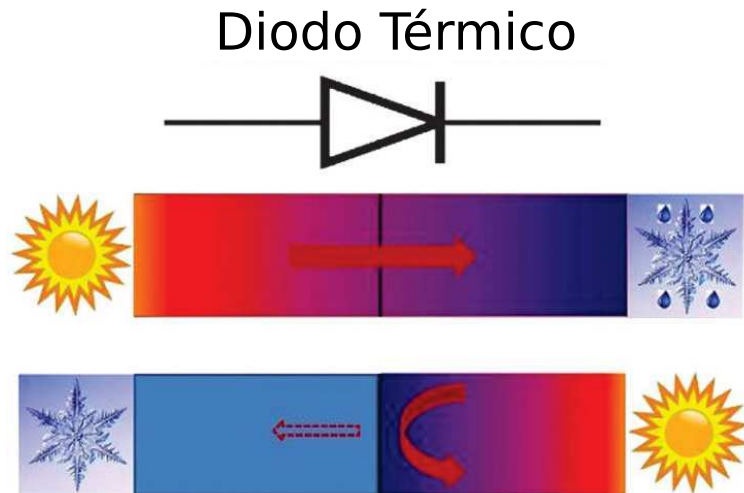
Uma proposta alternativa, baseada em um cristal fotônico 1D, considerava um dispositivo tipo diodo o qual exhibe propriedades não recíprocas em relação à direção da onda incidente. A assimetria na transmissão é devido à geração de segundo harmônico na parte esquerda da estrutura que possui não linearidade associada à reflexão de Bragg do harmônico fundamental da parte direita da estrutura [21]

2.1.3 Diodo Térmico

Assim como a condução de eletricidade, a condução de calor também é muito importante nos sistemas naturais e por isso muitos estudos também vem sendo realizados a fim de se dominar o transporte deste tipo de energia. Energia térmica é tipicamente uma forma de energia derivada das vibrações da rede, isto é, fônons, e usualmente considerada energia desperdiçada e prejudicial ao processamento de informação. Os fônons são responsáveis por várias propriedades dos materiais sólidos, como calor específico, condução térmica, condutividade elétrica e propagação do som. Embora manipular fônons seja bem mais difícil do que manipular elétrons, acredita-se que é possível fazê-lo, pois os sistemas naturais fazem isso em diversas situações. Portanto, tem-se investigado a possibilidade de usar fônons para carregar e processar informação por meio do transporte controlado de energia térmica e para isso dispositivos fonônicos que possam se comportar como diodos, transistores e portas lógicas térmicos tem sido propostos. A partir da possibilidade de construção destes componentes básicos de dispositivos térmicos funcionais é possível que o calor possa ser usado para processar informações. Desta maneira, além da eletrônica e da fotônica, a fonônica tem tido um recente avanço científico [69].

Retificadores térmicos são importantes em problemas de gerenciamento térmico. Uma aplicação bem prática destes dispositivos é para economia de energia. Por exemplo, em lugares que são muito quentes durante o dia e muito frios durante a noite, as paredes e janelas poderiam ser feitas de materiais com propriedade de retificação térmica, veja a figura 2.4 que ilustra a idéia de funcionamento do diodo térmico. Assim, durante o dia, quando geralmente a temperatura fora das construções é maior do que dentro, o fluxo de calor (de fora para dentro) seria impedido, permanecendo a temperatura do interior mais amena. Durante a noite, quando a temperatura externa estaria menor do que a interna, o fluxo (de dentro para fora) seria possível, mantendo a temperatura interna confortável sem a necessidade do uso de ar-condicionado. Além dessa, outras aplicações mais ambiciosas também são desejadas como a construção de computadores

Figura 2.4: Esquema que ilustra a ideia de funcionamento do diodo térmico. Quando a extremidade esquerda está em uma temperatura mais alta quando comparada com a extremidade direita, a estrutura permite a propagação de calor (representação superior). Quando ocorre o contrário, o lado direito está mais quente que o lado esquerdo, a transmissão não acontece.



Fonte: Li, 2012 [19]

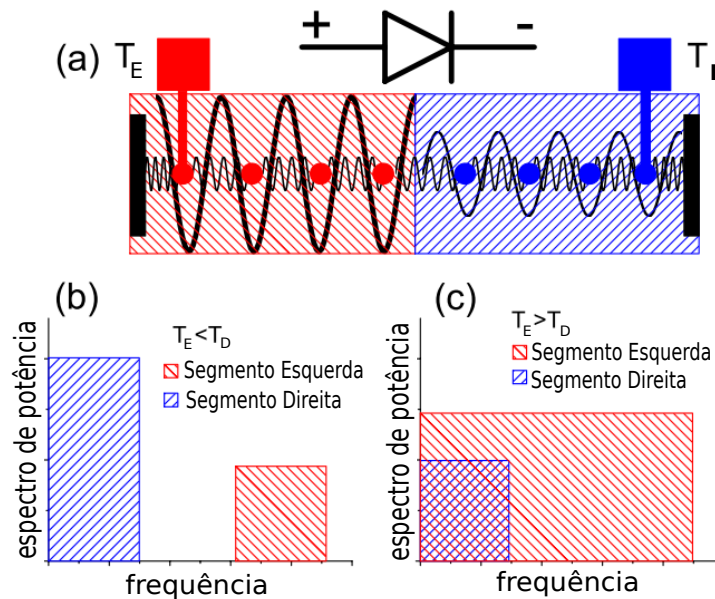
e processadores térmicos, entre outras.

Para que energia seja transportada com eficiência através de um sistema é necessário que ela excite as vibrações da rede (fônons) na sua frequência natural. Portanto, o calor pode ser propagado entre dois materiais se suas frequências ressonantes casarem. Se isso não acontecer, a transferência torna-se mais difícil. Portanto, a maneira mais intuitiva (porém não simples de ser realizada na prática) para se propor a quebra de simetria para realização do diodo térmico é usar dois materiais com espectros de potência que dependam distintamente da temperatura [19]. De modo que para um gradiente de temperatura positivo os espectros se sobreponham e, portanto, o sistema é favorável à troca de energia. Por outro lado, para um gradiente de temperatura negativo o mesmo não acontece e, logo, a transferência de calor é suprimida, veja figura 2.5.

Os primeiros estudos sobre efeito de fluxo unidirecional de calor são relativamente antigos (1930). No entanto eles não levaram em conta as propriedades fundamentais da dinâmica não linear e nem possuíam aparato computacional que permitissem grandes avanços. Somente mais recentemente (2002), Terraneo e colaboradores observaram o que acontece quando um material não linear com frequência ressonante que depende fortemente da temperatura é colocado entre dois meios quase lineares, cujas frequências dificilmente variam com a temperatura. Eles encontraram que as frequências dos materiais igualam umas com as outras quando uma queda de temperatura (ideia semelhante a queda de voltagem em circuitos eletrônicos) é introduzida em uma direção, e não se igualam quando a queda se dá na outra direção [70].

Controlar calor por meio das redes não lineares abriu as portas para o desenvolvimento de retificadores térmicos. A partir daí, uma série de trabalhos foram propostos explorando o “não

Figura 2.5: Conceito de um diodo térmico. (a) Esquema de um diodo térmico composto por dois materiais não lineares fracamente acoplados por molas lineares. O segmento da esquerda é uma cadeia de partículas com potencial on-site grande, indicado pela onda grande, enquanto que o da direita é uma cadeia de potencial on-site suficientemente menor. (b) Quando a temperatura do lado esquerdo T_E for menor do que a temperatura no lado direito T_D do diodo, ou seja, $T_E < T_D$, as partículas do lado esquerdo só se movimentam para altas frequências. Isso ocorre porque as partículas não tem energia suficiente para superar a barreira de potencial desta rede. Logo, os espectros de potência das cadeias não se sobrepõem e portanto não há fluxo de calor pelo diodo. (c) Quando $T_E > T_D$ as partículas do lado esquerdo possuem energia suficiente para mover-se livremente entre os vizinhos. Neste caso o seu espectro pode se estender para frequências menores e deste modo há a sobreposição dos espectros e fluxo de calor pelo diodo.

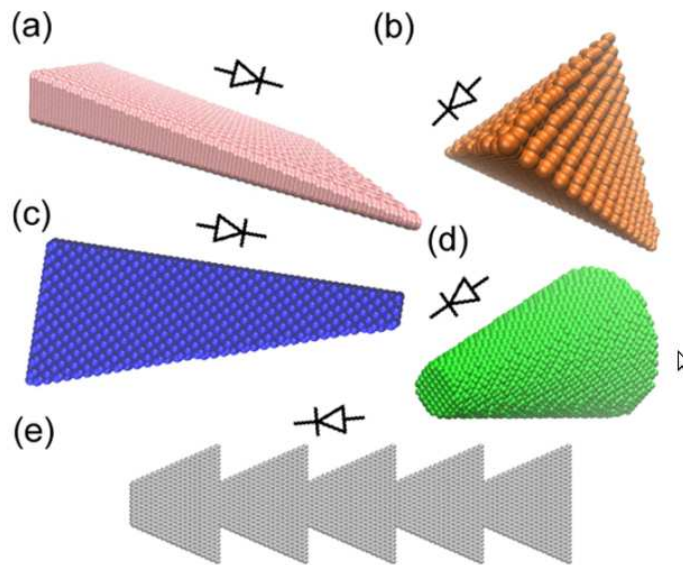


Fonte: Li, 2012 [19]

casamento' dos espectros de potência de junções (estruturas constituídas por dois seguimentos) para obter fluxo de calor assimétrico [71, 72]. A primeira comprovação experimental de um diodo térmico foi proposta por Chang e colaboradores em 2006 [18]. Eles usaram nanotubos de carbono e nanotubos de nitreto de bário e uma assimetria na distribuição da massa ao longo da estrutura. O trabalho mostrou que o fluxo de calor cresce na direção do decrescimento da massa. Esse resultado também é explicado pela diferença na sobreposição dos respectivos espectros de potência [73].

Entretanto, já se sabe que retificação térmica não é obtida apenas a partir de assimetrias devido à combinação de materiais diferentes. Recentemente, diodos térmicos tem sido previstos usando nanoestruturas geometricamente assimétricas suficientemente estreitas. Neste caso, o confinamento lateral de fônons pode ser responsável por mecanismos que conduzem à retificação térmica nesses sistemas (para mais detalhes consulte a referência [20]). Na figura 2.6 são mostradas algumas figuras que são exploradas para a realização de efeito diodo a partir de estruturas geometricamente assimétricas.

Figura 2.6: Esquemas de nanoestruturas assimétricas com potencial para aplicação em dispositivos de retificação térmica.



Fonte: Wang, 2014 [20]

O planejamento e a realização experimental do diodo térmico apresenta um passo importante no desafio do desenvolvimento tecnológico da fonônica. A partir dele, será possível projetar transistores térmico e portas lógicas, embora a condição de existência de um transistor seja mais difícil do que obter retificação térmica.

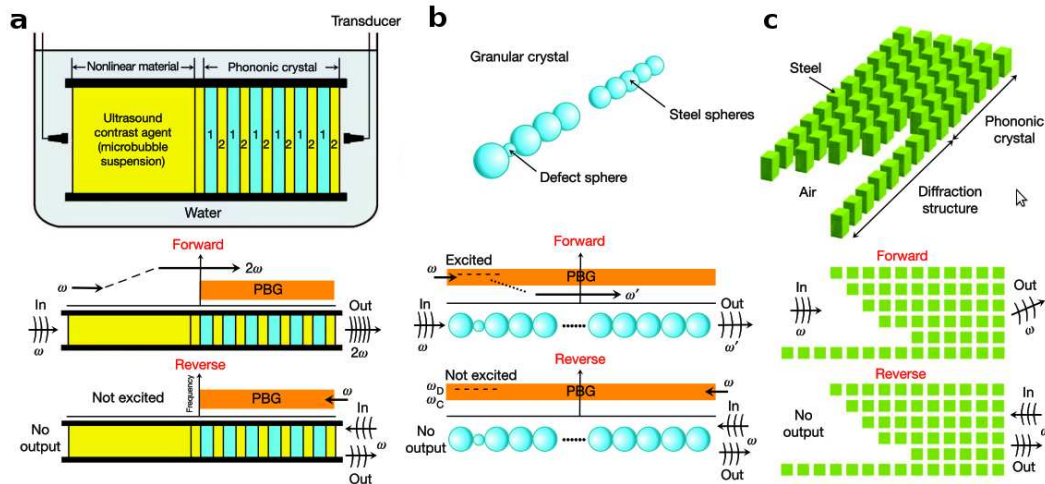
É importante enfatizar que quebra de simetria usando junção assimétrica (como junção de dois materiais distintos) ou explorando a resposta não linear do meio também são importantes mecanismos de controle de calor dinamicamente, útil na realização, por exemplo, de motores térmicos (para mais detalhes veja [19]).

2.1.4 Diodo Acústico

Som e calor podem ser descritos por vibrações mecânicas transmitidas através de uma rede atômica. Uma diferença fundamental entre elas, entretanto, é que as ondas sonoras oscilam em baixa frequência e propagam sobre largas distâncias, enquanto que a maioria das vibrações de calor oscilam em altas frequências e viajam pequenas distâncias. Devido a essas diferenças de características, estratégias diferentes são usadas para o controlar a propagação dessas ondas [74].

O desenvolvimento de diodos acústicos é importante para aplicações em barreiras sônicas unidirecionais, controle de ruídos, sensores ou ainda para aplicações médicas como por exemplo a destruição controlada de pedras nos rins por meio de técnicas de ultrassom e diagnóstico médico.

Figura 2.7: Diodos Acústicos. (a) Diodo construído a partir do acoplamento entre um meio não linear e um filtro de cristal fonônico linear. (b) Diodo obtido a partir de uma rede granular não linear com defeito servindo como modo de conversão da frequência e rede servindo como filtro. (c) Diodo linear baseado em difração assimétrica.



Fonte: Maldovan, 2013 [74].

O primeiro modelo de diodo acústico [75] foi proposto a partir da propagação longitudinal de uma onda sonora em um sistema 1D formado pelo acoplamento entre um cristal fonônico (CF), constituído de dois meios lineares, e um meio com forte não linearidade acústica (NL), semelhante ao mostrado na figura 2.7(a). A vantagem deste sistema é que ele é simples o suficiente para ser possível solução exata e complexo o suficiente para permitir o efeito diodo. Além disso, pode ser estendido a outros sistemas e ser bastante eficiente na prática.

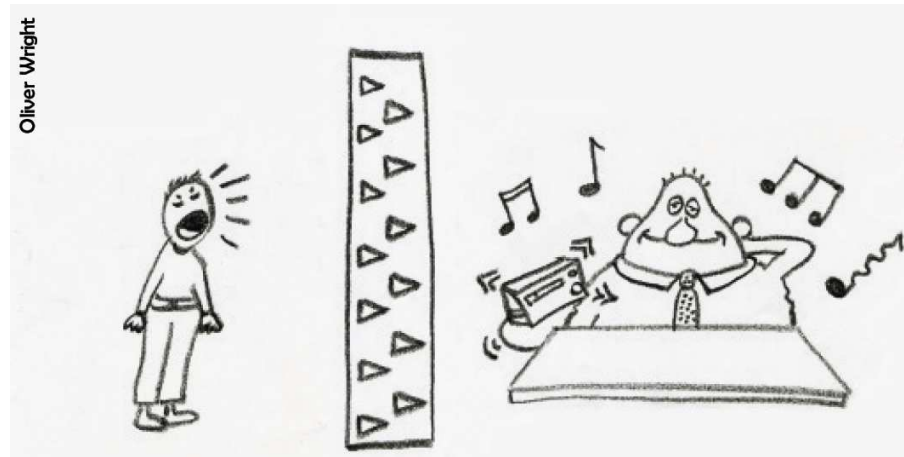
O fenômeno de retificação é obtido da seguinte maneira: a frequência da onda sonora incidente (ω) localiza-se dentro de uma banda proibida do CF. Portanto, a onda não propaga quando é incidida pelo lado do CF (sentido oposto, indicado pelo esquema inferior da figura 2.7(a)). Porém, quando a onda é inserida pelo lado do meio não linear, ao atravessar esse meio ondas em outras frequências são criadas e a onda incidente torna-se uma combinação dos modos fundamental e segundo harmônico. Ao atingir a estrutura linear, a mesma funcionará como um filtro permitindo apenas a passagem de onda com o dobro da frequência inicial (sentido direto, indicado pelo esquema superior da figura 2.7(a)). Deste modo o meio não linear é responsável pela conversão da frequência e o cristal fonônico age como um filtro de frequências.

A realização prática de um retificador acústico foi obtida em [24] usando água e vidro para construção do cristal fonônico e suspensão de microbolhas de um agente de contraste de ultrassom (UCA³) como meio não linear. As bolhas podem expandir ou contrair com a excitação acústica criando a resposta não linear requerida para geração do segundo harmônico [56].

Outros modelos de retificadores acústicos que também usam a combinação de não lineari-

³Sigla do inglês Ultrasound Contrast Agent

Figura 2.8: Ilustração de uma aplicação para retificador acústico. Barreira sônica, onde o som se propaga em uma direção mas não se propaga na direção oposta.



Fonte: Maznev, 2013 [27].

ridade e assimetria para obter transmissão assimétrica foram ainda propostos. Um deles, por exemplo, usa um metamaterial composto de uma membrana piezoelétrica colocado entre duas cavidades ressoantes de Helmholtz assimétricas para gerar dispositivos com forte não reciprocidade, extensa largura de banda e com potencial de aplicação para uso em baixas frequências e baixos níveis de som no ar ou líquido [76]. Outro modelo é baseado em um cristal granular, isto é, uma rede unidimensional de partículas elásticas em contato, comprimidas estaticamente e que interagem de maneira não linear com um defeito próximo à borda, como mostra a figura 2.7(b). O meio granular homogêneo age como um filtro permitindo a passagem de baixas frequências, enquanto que o defeito (esfera de menor diâmetro) é responsável por quebrar a periodicidade do cristal e converter a frequência para dentro de um modo de propagação [25].

É importante mencionar que transporte unidirecional do som também pode ser obtido em materiais lineares, como exemplificado na figura 2.7(c). Neste caso, o sistema consiste de um cristal fonônico em contato com uma estrutura de difração, de modo que de um lado tem-se uma superfície externa "suave"(direção inversa) e do outra "rugosa"(direção direta). Quando uma onda incide pelo lado da superfície suave com frequência ω dentro do PBG não há propagação. Por outro lado, se a onda for inserida pelo lado da estrutura de difração pode ser parcialmente transmitida. Uma vantagem deste tipo de estrutura é que a onda sonora não muda sua frequência ao passar pela estrutura [74].

Inspirado pelo trabalho de Liang [75], Lepri e Casati [32] propuseram um diodo acústico baseado em uma estrutura que consiste de dois materiais diferentes onde o filtro e a não linearidade são compartilhados com ambos materiais. O material não linear é assimétrico. O sistema foi modelado usando a equação discreta de Schrödinger. Isso permitiu que o modelo fosse resolvido analiticamente. Eles mostraram que mesmo para o caso de duas camadas não lineares (o que pode ser considerado um defeito tipo dímero na rede harmônica linear) há valores de

frequência e intensidade da onda incidente que produz retificação.

A partir de um modelo semelhante ao proposto em [32], nós investigaremos o papel da saturação da não linearidade na transmissão não recíproca através de uma cadeia discreta de dímeros assimétricos não lineares, mostrando que para forte saturação o efeito diodo é suprimido. Porém para um valor ideal, é possível ter o alargamento de uma janela de retificação, como será mostrado no capítulo 4.

2.2 Portas Lógicas

Na seção anterior, discutimos o princípio de funcionamento dos diodos e mostramos alguns trabalhos que têm explorado a não linearidade e assimetria como ferramentas para obtê-los em diferentes modelos de sistemas ópticos, térmicos e acústicos.

Nesta seção, abordaremos um pouco sobre o funcionamento das portas lógicas, as quais são blocos básicos dos circuitos lógicos, cruciais no processamento de dados que torna o mundo digital possível. São mais conhecidas no contexto eletrônico, mas com o aumento da necessidade de sistemas de comunicação e informação com maior velocidade de processamento e menor tamanho, também tem sido investigados em outros contextos. Além de todo o interesse na área de dispositivos totalmente óptico e térmico já discutido anteriormente, outra área que tem sido promissora é aquela que explora a computação molecular, principalmente baseada em DNA.

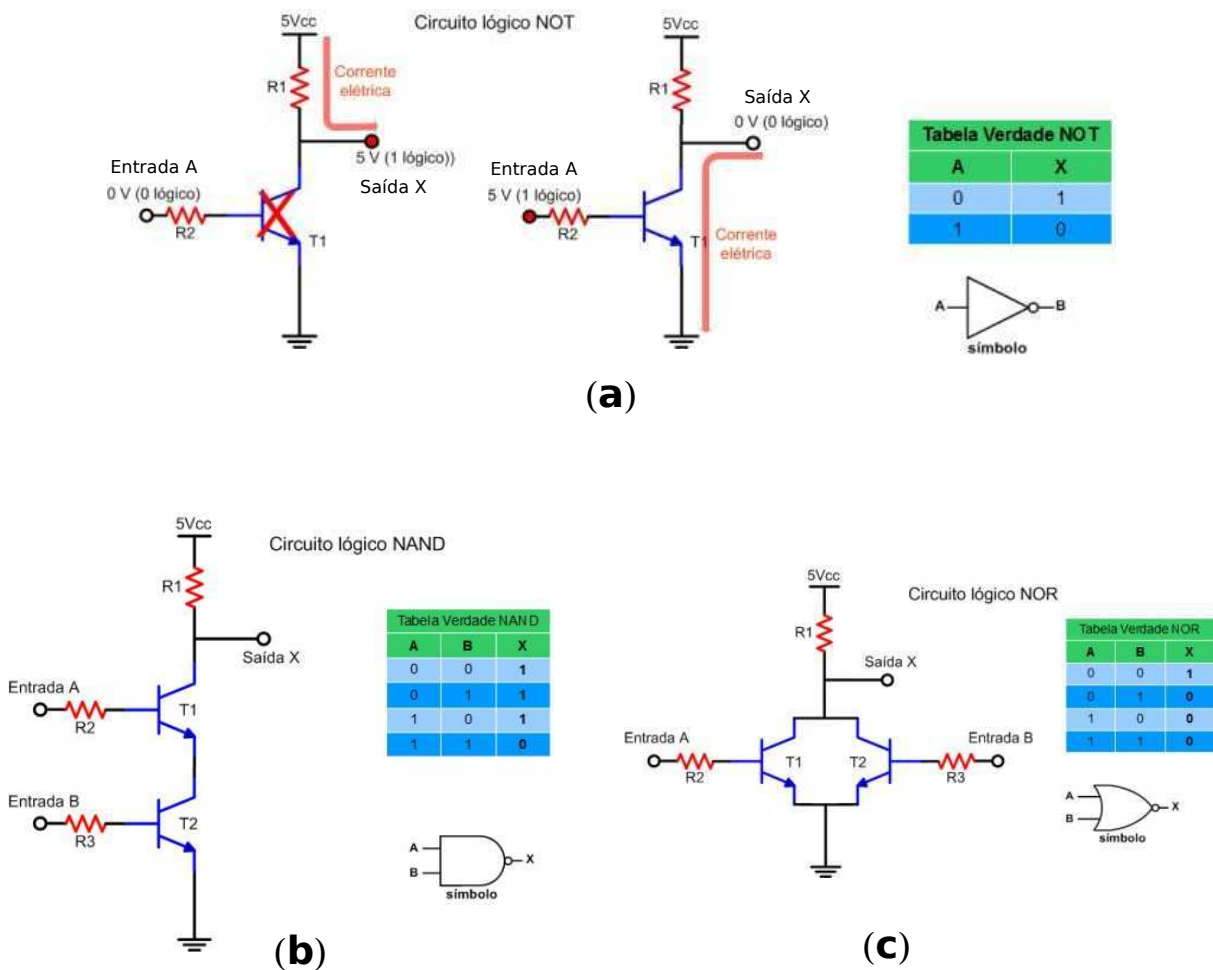
A seguir faremos uma breve introdução sobre a porta lógica eletrônica. Em seguida apresentaremos alguns modelos desenvolvidos em outras áreas que foram inspiradores para o desenvolvimento do presente trabalho.

2.2.1 Portas Lógicas Eletrônicas

Portas lógicas são circuitos eletrônicos capazes de realizar operações lógicas baseadas na álgebra booleana, onde dois ou mais estados de entrada originam um sinal de saída. Em eletrônica trabalha-se usualmente com dois estados (ou níveis lógicos) 0 ou 1: é o que chamamos de eletrônica digital. O nível lógico 0 normalmente é associado à ausência de tensão (ou tensão abaixo de um limiar de ativação) enquanto que o nível lógico 1, à presença de tensão (ou tensão acima do limiar de ativação). Os níveis lógicos podem ser associados a outras informações como mostrado na tabela 2.1.

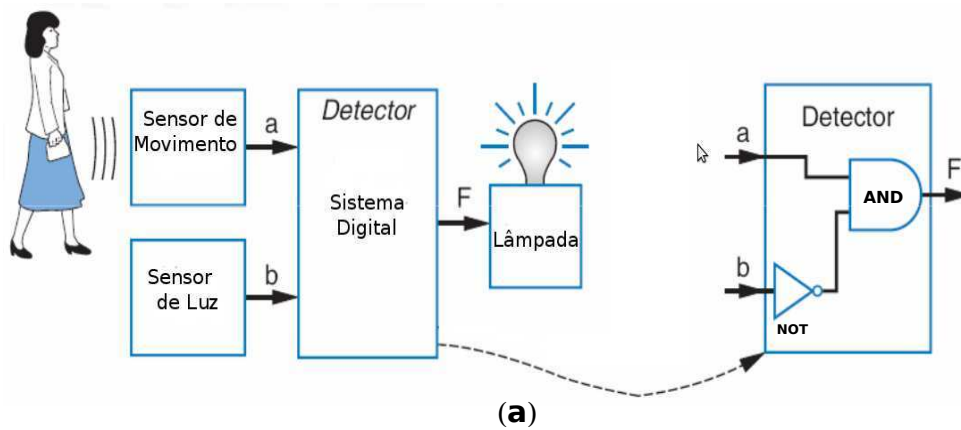
Para criar essa representação de 0 e 1 em sistemas eletrônicos usa-se os transistores, que são dispositivos que podem operar como uma chave binária cujo tempo de comutação (chaveamento) é de alguns nanosegundos. É a junção de vários transistores que permite a formação de diferentes portas lógicas. As portas fundamentais são três, OR, AND e Inversora (NOT) (opera-

Figura 2.9: (a) Esquema de funcionamento de um transistor. O componente azul é um transistor bipolar que atua como chave (liga/desliga). O coletor do transistor está sob uma tensão de 5V e o emissor está conectado à terra (0V). Assumimos que tensão 0V tem valor lógico 0 e tensão 5V tem valor lógico 1. Quando uma tensão de 0V (bit 0) é aplicada na entrada A do transistor, este não é excitado e, portanto, não conduz. Logo a corrente não passa pelo transistor e a tensão na saída X será próxima de 5V (bit 1), como mostra o esquema da esquerda. Porém quando uma tensão 5V (bit 1) é aplicada na base, o transistor comuta e passa a agir como um fio sem resistência, ligado diretamente à tensão de 0V (bit 0), como mostrado no esquema da direita. Resumindo, quando a entrada tem valor lógico 0, a saída tem valor lógico 1 e vice-versa, funcionando logicamente como um inversor (porta NOT), observe a tabela verdade. (b) Quando dois transistores são ligados em série, se a entrada A ou entrada B tiver bit 0, ou seja tensão 0V, o transistor correspondente estará aberto e portanto, o sistema não conduzirá e a tensão de saída será 5V que corresponde a bit 1. Se ambas as entradas tiverem bit 1, os transistores conduzem e tensão na saída X corresponderá ao bit 0, como mostrado na tabela verdade. Essa configuração corresponde a uma porta lógica do tipo NAND. (c) Quando dois transistores forem ligados em paralelos, somente quando a tensão nas duas entradas for 0V (bit 0) é que será possível a saída ter tensão 5V (bit 1), observe a tabela verdade. Essa configuração corresponde uma porta do tipo NOR.



Fonte: Figura adaptada da ref. [77]

Figura 2.10: (a) Representação simplificada do circuito lógico de um sensor de presença que acende uma lâmpada quando o ambiente está escuro e uma pessoa aproxima. (b) Tabela verdade que resume o funcionamento do circuito.



SITUAÇÃO	a	b	\bar{b}	$F = a\bar{b}$
Ausência de movimento e luz	0	0	1	0
Ausência de movimento e presença de luz	0	1	0	0
Presença de movimento e ausência de luz	1	0	1	1
Presença de movimento e luz	1	1	0	0

(b)

Fonte: Figura adaptada da ref [78]

ção de complementação, ou negador), que é o funcionamento do transistor em si, como mostra a figura 2.9. A partir da combinação dessas é possível obter todas as outras portas necessárias em circuitos mais complexos (NAND, NOR, XOR, XNOR). Veja na figura 2.9 o esquema de funcionamento do transistor e de algumas associações de transistores com a respectiva porta que ela origina.

Para ilustrar o funcionamento de um pequeno circuito lógico vamos analisar um exemplo simplificado do funcionamento de sensor de luz, o qual acende uma lâmpada quando está escuro e uma pessoa aproxima, observe a figura 2.12. Neste caso temos duas informações de entrada, a

Tabela 2.1: Algumas representações de Variáveis Lógicas

Nível Lógico 0	Nível Lógico 1
Falso	Verdadeiro
Desligado	Ligado
Baixo	Alto
Não	Sim
Chave aberta	Chave fechada

presença (ausência) de pessoa, o que corresponde a função lógica bit 1 (bit 0) e presença (ausência) de luz, bit 1 (bit 0). A informação de saída é se a lâmpada acende (não acende) representada pela função lógica 1 (0). A lâmpada só acende (bit 1) quando movimento é detectado (bit 1) e não há luz (bit 0). Então um circuito digital que pode realizar esta função é composto por uma porta AND e NOT, como mostra a figura 2.12(a) e resumido na tabela verdade da figura 2.12(b).

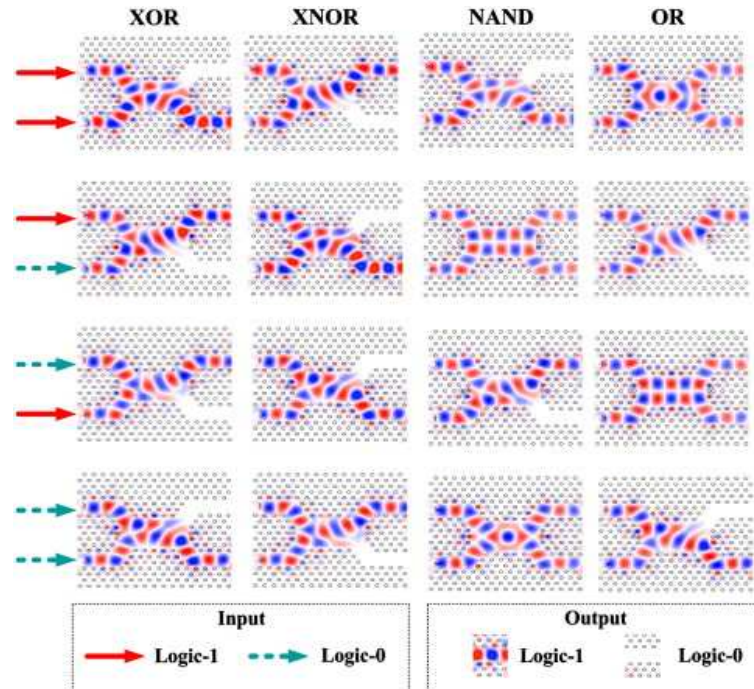
Como podemos observar, portas lógicas são elementos essenciais nos sistemas de processamento eletrônico. Com o crescente interesse em desenvolver novas técnicas de processamento baseado em outros contextos, modelos que possibilitem a obtenção de portas lógicas têm sido muito investigados. Nas próximas seções, abordaremos alguns trabalhos que têm proposto portas lógicas totalmente óptica e porta lógicas baseadas em DNA.

2.2.2 Outras portas lógicas

No cenário das redes de informação totalmente ópticas, microprocessadores fotônicos, processadores de sinal óptico e instrumentação óptica, as portas lógicas são componentes chaves para a realização de funções de chaveamento, endereçamento, decodificação de dados, criptografia, e reconhecimento de cabeçalhos, entre outras funções. Por exemplo, portas AND são usadas para realizar o reconhecimento de endereço, modificação de cabeçalho e verificação da integridade de dados. Portas XOR podem executar funções de comparação de padrões de dados, comutação de pacotes, criptografia de dados, entre outras. Porta NOT pode ser usada para inversora ou chaveadora. Portas XNOR são usadas para realizar a detecção do limite da funcionalidade [79].

Há diversos métodos para realizar funções lógicas totalmente óptica, como amplificador óptico semiconductor (SOA) [80,81], efeito de interferência óptica [36,39,79] e efeito não linear de terceira ordem [35, 82–85]. Acopladores direcionais têm mostrado potencial para obtenção de portas lógicas. Baseado em interferência de multi modo, portas XOR, XNOR, NAND e OR têm sido obtidas para sinais do tipo binary-phase-shift-signal [36]. Efeitos não lineares têm sido investigados em acopladores direcionais e tem sido demonstrado que, em acopladores assimétricos, a energia na porta de saída tende aparecer no guia de onda com forte efeito Kerr apenas quando um guia é excitado. Quando ambos os guias são excitados, a distribuição da energia na saída depende da diferença de fase entre os sinais de entrada. Explorando este comportamento, tem sido possível obter portas AND, OR e XOR controlando a não linearidade do sistema [35]. Nesse trabalho, os autores investigaram ainda, o comportamento do contraste em relação a diferença de fase dos pulsos incidentes, mostrando que para uma determinada diferença de fase há um melhor valor para o contraste, indicando que a diferença de fase pode ser relevante na obtenção de portas lógicas. Desenho de portas lógicas baseadas em acopladores assimétrico não lineares também foi obtido para modulação de fase cruzada. Portas XOR, OR de um novo tipo podem ser realizadas mudando a potência do laser ou a fase do pulso de

Figura 2.11: Distribuição de campo para mostrar o comportamento das portas lógicas totalmente ópticas obtidas através de um guia de onda em cristal fotônico. A definição dos valores lógicos de entrada estão associados à fase do sinal BPSK e é diferente para cada fonte. Os valores lógicos de saída são dados pela presença ou não de sinal.



Fonte: Liu, 2013 [39]

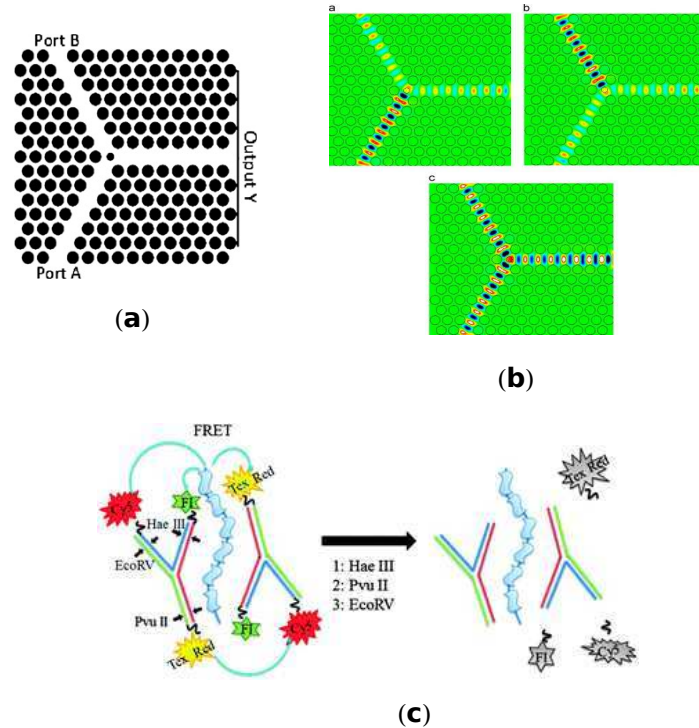
entrada [84]

Cristais fotônicos (PhC), como já discutido na seção 2.1.2 possuem grande potencial para aplicação em dispositivos fotônicos integrados pois permitem elaborar dispositivos altamente compactos e com baixa consumo de energia e, por isso, tem recebido crescente atenção. Vários modelos têm sido desenhados e discutidos para obtenção de portas lógicas nestas estruturas. Efeitos não lineares também têm sido investigados. Portas AND baseadas em anéis não lineares ressonantes foram obtidas em [86]. Em placas de cristal fotônico com grande não linearidade e baixo índice de refração, tem sido possível realizar portas totalmente óptica do tipo AND, NAND, OR e NOR [83].

Portas XOR, XNOR, NAND e OR são encontradas em guias de onda de PhC baseadas em interferência de multi modos (MMI) para sinais "binary-phase-shift-keyed". Nesse modelo o valor lógico da entrada é determinado pela informação da fase e o valor lógico da saída é determinado pela informação. Observe a figura que resume o modelo e as portas obtidas [39].

Recentemente, uma série de trabalhos tem explorado a obtenção de portas lógicas em redes de cristais fotônicos na forma de Y, baseados apenas na interferência entre os feixes incidentes. As redes apresentam estruturas simples, baixo consumo de energia e fácil operação. Porém apresentam dificuldade para controlar a diferença de fase entre os sinais de entrada e para obter

Figura 2.12: Fonte:Exemplos de estruturas tipo Y que tem sido usadas para obtenção de portas lógicas. (a) Guia de onda em cristal fotônico [40]. (b) Exemplo de aplicação da estrutura para obtenção de porta AND [40]. (c) Representação esquemática de estrutura Y-DNA por meio da qual é possível obter alguns tipos de portas lógicas [89].



Fonte: Figura adaptada pela autora.

alta intensidade de contraste entre os estados "0" e "1" [87]. A estrutura consiste de um guia de onda na forma de Y, com duas portas de entrada e uma porta de saída, e no centro é introduzido um defeito, cuja configuração será responsável pela otimização da performance das portas, veja a figura.

Baseado na estrutura descrita acima, Rani et al. obtiveram a porta AND de contraste 6 dB [40]. Portas AND, XOR e NOT foram obtidas por Wang et al. em estrutura similar mas com um melhor controle da diferença de fase [87]. Algumas variações desta estrutura tem sido propostas a fim de obter as interferências construtivas e destrutivas necessárias para obtenção das portas lógicas [79, 88].

Este tipo de estrutura na forma de Y também tem sido investigada em nanotubos de carbono para aplicação em dispositivos nanoeletrônico [13, 90], tendo sido possível observar efeito tipo diodo [12] e funções lógicas, como por exemplo porta AND [14].

Em sistemas biomoleculares, estruturas de DNA na forma de Y (Y-DNA) apresentam importante papel e têm sido utilizadas em processos lógicos [91]. O DNA, responsável pelas informações genéticas de todos os organismos vivos, tem sido considerado um poderoso meio para armazenamento de dados e processamento de informação. A ideia do desenvolvimento

de uma computação molecular tem promovido imenso interesse no desenho e construção de sistemas de DNA que podem realizar operações lógicas booleanas.

Portas lógicas baseadas em DNA são constituídas de um sinal de entrada, que pode ser físico como luz ou pressão, químico como íons proteínas ou ácidos nucleicos; um oligonucleotídeo, que é capaz de interagir especificamente com a entrada; e um sinal de saída que representa o estado da porta lógica [89].

Desde que a primeira porta AND foi sugerida, alguns trabalhos tem reportado a construção de diferentes tipos de portas lógicas baseadas em estruturas de DNA na forma de Y [50, 92]. Este tipo de estrutura de multi braços permite mais escolhas para construção de plataforma de sensores, resultando em funções de maior complexidade.

Portanto, diante da importância, nos diferentes contextos, que estruturas na forma de Y apresentam, e baseado no interesse em caracterizar sinais eletrônicos transmitidos em cadeias discretas devido à possibilidade de uso de estruturas de ácidos nucleicos como componentes bio-eletrônicos [93], investigaremos neste trabalho a capacidade de obter portas lógicas em uma junção tipo Y de cadeias discretas, quase unidimensionais conectadas por um sítio não linear. A partir de uma aproximação tight binding para descrever a propagação de ondas nesta estrutura, será obtido o espectro de transmissão em função da intensidade da não linearidade e da diferença de fase entre as ondas de entrada. Em particular, mostraremos a realização de operações lógicas do tipo AND, OR e XOR.

3

Modelo tight-binding de cadeias discretas com defeito não-linear

Na física muitas considerações simplificadoras são usualmente feitas quando se deseja estudar um sistema que possui alta complexidade, objetivando tornar menos difícil o seu tratamento. Na física de estado sólido, a caracterização da dinâmica eletrônica é feita descrevendo estes como sendo usualmente compostos ligados a um arranjo de íons iguais. Uma aproximação comumente utilizada para representar um metal ou um semicondutor é considerá-los como sendo um arranjo periódico de íons pesados circundados por uma nuvem eletrônica, de forma que o sistema é mantido ligado através de forças eletrostáticas. A dinâmica de um elétron neste material é fortemente afetada pela periodicidade do potencial gerado pelos íons da rede, bem como pela vibração destes íons em torno de sua posição de equilíbrio [4].

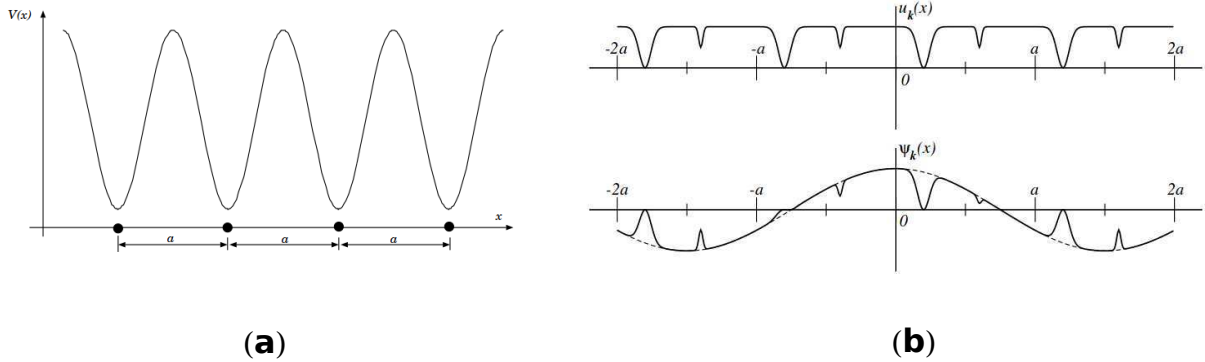
Neste capítulo vamos revisar as principais aproximações necessários na formulação de modelos no contexto da física do estado sólido, bem como investigar as modificações que ocorrem nas propriedades do transporte eletrônico quando defeitos e não linearidade são levados em consideração. Por fim, analisaremos o modelo proposto por Lepri e colaboradores [32] para estudar transporte não recíproco.

3.1 Modelo de Bloch

A diferença nas propriedades condutoras de metais, isolantes e semicondutores são consequências da existência de uma estrutura de bandas de energia, a qual resulta da interação entre elétron-rede e do preenchimento dos níveis de energia obedecendo ao princípio de exclusão de Pauli.

O surgimento de estrutura de bandas de energia ocorre quando assumimos que os elétrons em uma rede cristalina periódica interagem com os íons da rede por meio de um potencial

Figura 3.1: (a) Exemplo de potencial periódico unidimensional. Sendo a força entre íons e elétrons atrativa, o potencial eletrônico deve apresentar mínimos nas posições ocupadas pelos íons. (b) Exemplo de função de Bloch. No gráfico de cima está representada a função moduladora $u_k(x)$, com período a ; No gráfico de baixo está representada a função de onda propriamente dita, $\psi_k(x)$, (linha cheia) e a onda plana modulada $\exp(ikx)$ (linha tracejada).



Fonte: Moreira, 2002 [94]

periódico $U(\mathbf{r})$, o qual possui a mesma periodicidade da rede, ou seja, $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, onde \mathbf{R} é o vetor da rede de Bravais. Aqui não é levado em conta as interações elétron-elétron. Um exemplo de potencial periódico pode ser visto na figura 3.1(a).

Portanto, a equação de Schrödinger para um elétron nesse potencial é dado por

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi. \quad (3.1)$$

O físico suíço Felix Bloch demonstrou que as autofunções que satisfazem a equação 3.1 para um potencial periódico tem a forma de uma onda plana modulada em amplitude por $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (como exemplificado na figura 3.1(b)), isto é,

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (3.2)$$

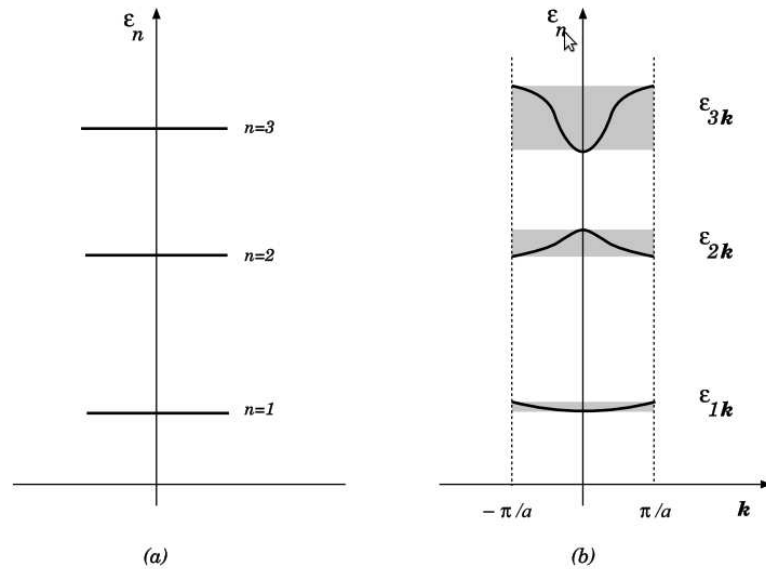
onde a função moduladora tem a periodicidade da rede cristalina, com $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Este é o famoso teorema de Bloch, fundamental para a compreensão de muitas das propriedades físicas dos sólidos, e pode ainda ser expressado como ¹

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.3)$$

Isso significa que a função de onda de um elétron na posição \mathbf{r} difere da função de onda na posição $\mathbf{r} + \mathbf{R}$ apenas por um fator de fase. Portanto, é possível conhecer a função de onda do elétron em diferentes pontos do cristal a partir do conhecimento da função de onda em um

¹Para demonstrações consulte [95]

Figura 3.2: (a) Níveis de energia atômicos resultantes da resolução da equação de Schrödinger para um potencial periódico. (b) Bandas de energia dos estados eletrônicos de um sólido (área sombreada). As formas apresentadas para as funções de energia são arbitrárias.



Fonte: Moreira, 2002 [94]

ponto.

Observe que a função de onda de Bloch tem dois índices, um que indica o vetor de onda \mathbf{k} e outro que indica o índice de banda n . O vetor de onda \mathbf{k} pode sempre ser escrito dentro da primeira zona de Brillouin e está associado ao momento linear cristalino dos elétrons de Bloch, o qual não é identificado apenas como $\hbar\mathbf{k}$ semelhante ao que ocorre com elétrons livres, uma vez que as funções de Bloch não são autofunções dos operador momento linear. Desta maneira, o momento linear num estado de Bloch não apresenta um valor bem definido.

O índice de banda n se deve ao fato que para cada \mathbf{k} existe um conjunto de soluções da equação de Schrödinger, como pode ser visto substituindo a equação 3.3 na equação 3.1.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\mathbf{k})^2 + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}, \quad (3.4)$$

a qual também é uma equação de autovalores. Devido à periodicidade da função $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, para cada valor do vetor de onda \mathbf{k} teremos um conjunto de autovalores $\epsilon_n(\mathbf{k})$, e por isso a necessidade do índice n . Portanto para cada valor de n tem-se um conjunto de estados eletrônicos com energias contínua em \mathbf{k} , que é chamada de banda de energia, veja figura 3.2.

Em geral, a função que caracteriza os estados dos elétrons sob potencial periódico depende da estrutura cristalina do sólido onde se encontra o elétron, ou seja, do potencial eletrônico $U(\mathbf{r})$. A seguir será apresentado um método para calcular as bandas de energia chamado tight-binding.

3.2 Método Tight-Binding

O método Tight-Binding (TB) é uma aproximação padrão para cálculos de estruturas eletrônica baseada em simetrias e parâmetros semi-empíricos. O ponto central desta abordagem é o conceito de orbitais localizados, isto é, o estado de Bloch é escrito como uma combinação linear dos orbitais atômicos centrados nos sítios da rede, como mostrado na equação 3.5. Isso é possível pois no cristal a superposição das funções atômicas de átomos vizinhos é pequena, e a energia extra do elétron no cristal, devida a essa superposição, também é pequena comparada à energia que ele possuía originalmente no átomo. Portanto, a função de onda do elétron em um cristal na aproximação TB é dada por

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (3.5)$$

sendo $\frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$ os coeficientes da combinação linear, escolhidos de maneira que a função de onda 3.5 satisfaça o teorema de Bloch (eq. 3.3) e seja normalizada. O somatório é sobre todos os átomos da rede e $\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ são as orbitas atômicas dos átomos nas posições \mathbf{R} em cada banda n .

O Hamiltoniano do elétron no cristal pode ser escrito como a soma de uma parte atômica e outra parte que representa o potencial causado por todos os outros íons do cristal, $H = H_{at} + H_{cr}$. Como assumimos que a superposição das funções de onda é pequena, temos que $H_{cr} \ll H_{at}$. Portanto, a energia total do sistema é dada como $E_{\mathbf{k}} = \epsilon_0 + E_{cr}$. Sendo ϵ_0 a energia do átomo isolado, onde

$$H_{at}\phi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n\phi_n(\mathbf{r}), \quad (3.6)$$

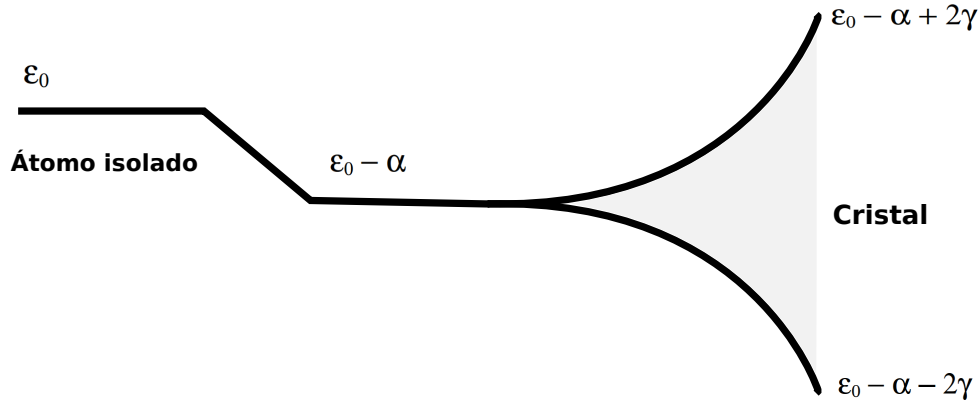
e E_{cr} a energia extra devido a superposição das funções de onda localizadas em sítios atômicos separados por $\mathbf{R} \neq 0$ dada por

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}}^* | H_{cr} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \int \phi_{\mathbf{R}'}^* H_{cr} \phi_{\mathbf{R}} d\mathbf{r}, \quad (3.7)$$

onde $\phi_{\mathbf{R}} \equiv \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$.

A dupla soma acima pode ser simplificada da seguinte maneira: os termos nos quais $\mathbf{R} - \mathbf{R}' = 0$, representam perturbações da rede sobre o sítio \mathbf{R} , serão representados por α . Termos em que $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ é da ordem do espaçamento da rede para primeiros vizinhos e representa a superposição das funções de onda, a integral deste termo será representada como γ (no contexto da física do estado sólido, essa integral é conhecido como hopping). Finalmente, os termos em que $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ é maior que o espaçamento da rede e por isso a integral é nula (como já dito anteriormente a superposição da função onda ocorre apenas próximo aos sítios). Portanto a energia E_{cr} é dada por

Figura 3.3: Fonte: Esquema que representa a formação de uma banda de energia na aproximação tight binding.



Fonte: Figura adaptada da referência [96]

$$E_{cr} = -\alpha - \gamma \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}, \quad (3.8)$$

onde

$$\alpha \equiv - \int \phi_{\mathbf{R}}^* H_{cr} \phi_{\mathbf{R}} d\mathbf{r} \quad (3.9)$$

$$\gamma \equiv - \int \phi_{\mathbf{R}'}^* H_{cr} \phi_{\mathbf{R}} d\mathbf{r}. \quad (3.10)$$

Note que α é justamente o valor esperado de H_{cr} no sítio atômico. Este termo pode ser reconhecido como uma correção perturbativa de primeira ordem na energia do elétron em relação ao átomo isolado. O cálculo dos termos α e γ requer o conhecimento detalhado de H_{cr} . Por isso na prática o que se faz é considerar estas quantidades como parâmetros a serem ajustados.

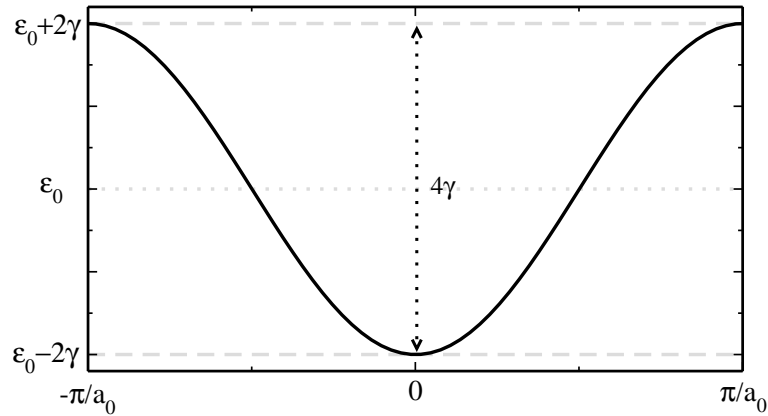
A energia total do sistema, portanto, será dada por

$$E_k = \epsilon'_0 - \alpha - \gamma \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}. \quad (3.11)$$

Na figura 3.3 é mostrado um esquema do desdobramento de um nível atômico em uma banda de energia, na aproximação tight binding.

Para melhor clareza, vamos obter a relação de dispersão (relação entre a energia e o vetor de onda \mathbf{k}) para uma banda-s em um cristal unidimensional. Neste caso os vetores de translação são $\mathbf{R} = na_0\mathbf{i}$, onde n é um inteiro, a_0 é a separação atômica e \mathbf{i} é o vetor unitário na direção x . Aqui só há dois vetores de translação de vizinhos próximos $\tau = \pm a_0\mathbf{i}$. Portanto, a energia do

Figura 3.4: Figura que mostra o comportamento da relação de dispersão para uma banda-s em um cristal unidimensional. A energia mínima é encontrada em $k = 0$ e a energia máxima em $\pm\pi/a_0$.



Fonte: Autora, 2015

sistema a partir da equação 3.11 será

$$\begin{aligned} E_k &= \epsilon_0 - \alpha - \gamma(e^{ika_0} + e^{-ika_0}) \\ &= \epsilon'_0 - 2\gamma\cos(ka_0) \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde $\epsilon_0 - \alpha = \epsilon'_0$ representar a energia do elétron no átomo.

Na figura 3.4 é mostrado o relação de dispersão obtida pela equação 3.12. Note que a energia mínima $E_k = \epsilon_0 - \alpha - 2\gamma$ é obtida em $k = 0$ e a energia máxima $E_k = \epsilon_0 - \alpha + 2\gamma$ em $k \pm \pi/a_0$, ou seja nos limites da primeira zona de Brillouin. Os valores de k variam continuamente e a energia poderá assumir qualquer valor dentro da banda. A largura da banda é dada por 4γ e portanto depende da superposição das ondas vizinhas.

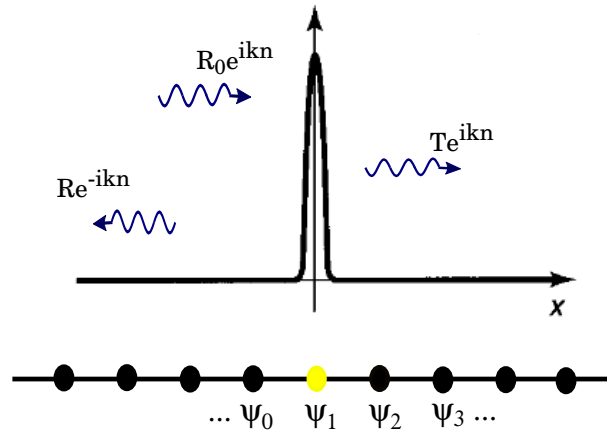
3.3 Coeficiente de transmissão

Nesta seção vamos examinar as propriedades de transporte de alguns sistemas por meio do estudo do comportamento do coeficiente de transmissão. Os sistemas são modelados pela equação de Schrödinger discreta dada por

$$i\frac{d\Psi_n(t)}{dt} = V_n\Psi_n(t) - \Psi_{n+1}(t) - \Psi_{n-1}(t) + \alpha|\Psi_n(t)|^2\Psi_n(t), \quad (3.13)$$

onde $\Psi_n(t)$ é amplitude da função de onda escrita na forma estacionária como $\Psi_n(t) = \psi_n e^{-iEt}$, V_n é a energia potencial de cada sítio. A energia de hopping, sem perda de generalidade, consideraremos sempre igual a -1 (nossa escala de energia) e α é o termo não linear. A partir daqui, salvo quando mencionado, assumimos constante de rede igual a unidade.

Figura 3.5: Esquema que representa o problema de uma cadeia discreta linear com um defeito. Esse defeito pode ser um sítio linear com energia potencial diferente dos outros sítios (primeiro exemplo) ou um sítio não linear (segundo exemplo). A resolução destes problemas é semelhante ao problema de espalhamento por um potencial tipo delta.



Fonte: Autora, 2015

O primeiro problema de interesse consiste no transporte de uma quase partícula em uma cadeia linear unidimensional discreta infinita com um defeito, semelhante ao ilustrada na figura 3.5. Neste caso $\alpha = 0$, pois o sistema é linear e $V_1 \neq 0$, ou seja, apenas no sítio $n = 1$ o potencial é diferente de zero (defeito). A relação de dispersão é dada por $E = -2\cos(k)$, com $k \in [-\pi, \pi]$. Então a equação 3.13 na forma estacionária para este problema é

$$\psi_{n-1} = -\psi_{n+1} + v\psi_n, \quad (3.14)$$

sendo $v = V_n - E$.

Quando uma onda com momento k é inserida pela esquerda da cadeia, ela será espalhada pelo defeito em parte refletida e parte transmitida. Portanto, à esquerda do defeito, encontraremos ondas incidentes de amplitude R_0 e ondas refletidas de amplitude R , enquanto que a direita, ondas transmitida de amplitude T , dadas pela seguinte solução

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 1, \\ T e^{ikn}, & n \geq N. \end{cases} \quad (3.15)$$

onde N indica o número de sítios com potencial $V \neq 0$. Neste caso $N = 1$.

Como nosso problema é discreto vamos utilizar um método iterativo para encontrar o coeficiente de transmissão. Esse método consiste em associar à equação de Schrödinger um mapa para um potencial tipo delta e partindo do conhecimento da função de onda no sítio ψ_{n+1} encontrar a função no sítio ψ_n . Este tipo abordagem é discutida em [97, 98] e fornece uma ferramenta simples e eficiente para entender propriedades de transporte e encontrar expressões analíticas,

principalmente em problemas não lineares [99]. É importante destacar que propriedades eletrônicas também podem ser estudadas usando o método de matriz de transferência, como feito em [15, 93], mas esse não foi o objetivo do nosso trabalho. Portanto, a equação de Schrödinger pode ser representada de maneira geral como

$$u_{n-1} = -v_n + (V_n - E + \alpha_n |u_n|^2)u_n, \quad v_{n-1} = u_n \quad (3.16)$$

onde $u_n = \psi_n$ e $v_n = \psi_{n+1}$. Atenção para o fato desta equação ser geral, portanto para o nosso exemplo temos que $\alpha_n = 0$, ou seja, o sistema é linear.

A partir das funções de onda para $n = 0$ e $n = 1$ obtidas pela equação 3.15, chegamos a uma expressão que nos dá a amplitude da onda incidente

$$R_0 = \frac{\psi_0 e^{-ik} - \psi_1}{e^{-ik} - e^{ik}}. \quad (3.17)$$

Usando a equação 3.16 para $n = 1$, encontramos

$$\psi_0 = T e^{ik} (v - e^{ik}), \quad (3.18)$$

onde $\psi_1 = T e^{ik}$ e $\psi_2 = T e^{2ik}$ foram dados pela equação 3.15.

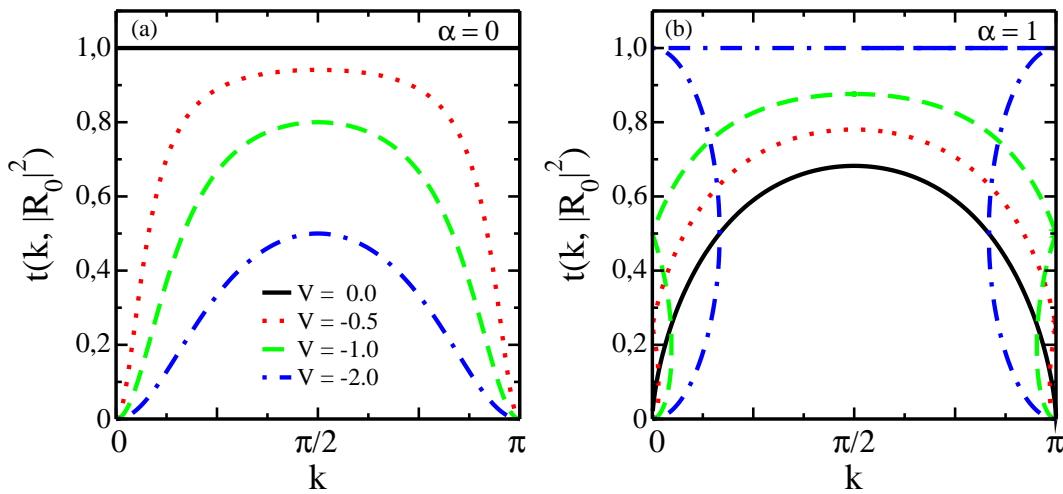
Com um pouco de álgebra e fazendo as substituições necessárias, chegamos à expressão que nos mostra o comportamento da transmissão em função do vetor de onda para uma cadeia linear com defeito. Lembrando que V é a energia potencial do defeito.

$$t = \left| \frac{T}{R_0} \right|^2 = \frac{1}{\left(\frac{V}{2\text{sen}(k)} \right)^2 + 1} \quad (3.19)$$

Analisando a equação 3.19, observa-se que a transmissão não depende da intensidade da onda incidente, como deve ser para o caso linear, e no limite de vetor de onda pequeno, o coeficiente de transmissão para o nosso problema é igual ao encontrado para o caso contínuo. É possível notar também que quando a energia potencial for nula, a transmissão é igual a unidade, ou seja, toda onda incidida é transmitida, isto acontece porque neste caso o sistema não apresenta defeito (todos os sítios possuem a mesma energia on-site) e portanto, não temos espalhamento. A transmissão em $k = 0$ e em $k = \pi$ é nula e é máxima em $k = \pm\pi/2$, como pode ser visto no espectro de transmissão mostrado na figura 3.6(a) para diferentes valores de V .

Agora vamos investigar o coeficiente de transmissão para uma cadeia linear contendo um defeito não linear. Neste caso, a equação de Schrödinger discreta e estacionária é semelhante a

Figura 3.6: Espectro de transmissão obtido para uma cadeia unidimensional discreta linear (a) e não linear (b) para diferentes valores do potencial e $|R_0|^2 = 2.0$. (a) O coeficiente de transmissão para uma cadeia linear com um defeito ($V \neq 0$) será sempre menor que 1. A transmissão é máxima em $k = \pm\pi/2$ e nula em $k = 0$ e nas bordas da zona de Brillouin. Na ausência de potencial ($V = 0$) não há espalhamento da onda e neste caso, o coeficiente de transmissão não depende do vetor de onda e será igual a 1. (b) Para o caso não linear, o espectro de transmissão apresenta regiões de biestabilidade quando $V \neq 0$, ou seja, para um mesmo valor da onda de incidência é possível encontrar diferentes valores de transmissão. Por isso é possível que o sistema transmita em $k = \pm\pi$ e em $k = 0$. Para o caso em que $|R_0|^2 = -\frac{V}{\alpha}$ é possível ter transmissão máxima para qualquer valor de k (linha azul). Neste caso, a não linearidade cancela o efeito do potencial local do defeito.



Fonte: Autora, 2015

equação do problema anterior (eq. 3.14)

$$\Psi_{n-1} = -\Psi_{n+1} + v\Psi_n\Psi_n. \quad (3.20)$$

no entanto, $v = V_n - E + \alpha|\Psi_n|^2$. Note que agora temos $\alpha \neq 0$ no sítio $n = 1$, pois o defeito é não linear.

Repetindo os mesmos cálculos anteriores, o coeficiente de transmissão para uma cadeia unidimensional com um defeito não linear é dado pela equação transcendental

$$t = \left| \frac{T}{R_0} \right|^2 = \frac{1}{\left(\frac{V + \alpha|T|^2}{2\text{sen}(k)} \right)^2 + 1}. \quad (3.21)$$

onde $|T|^2 = t|R_0|^2$. Note que a transmissão é função da intensidade da onda incidente e obedece a uma equação polinomial do terceiro grau que admite até três soluções reais. Observe que para o caso $\alpha = 0$ recuperamos a mesma expressão do caso linear descrito anteriormente. Para $\alpha \neq 0$ o sistema apresenta multi estabilidade relacionada à multiplicidade de soluções. Isso significa que a partir de uma onda de incidência de amplitude $|R_0|$ podemos encontrar até três

valores de transmissão diferentes. Esse comportamento é característico de sistemas não lineares e é responsável por fenômenos não triviais nesses sistemas, como será explorado no próximo capítulo. Na figura 3.6(b) é mostrado o espectro de transmissão para o caso não linear.

É importante destacar ainda que a presença de não linearidade garante que, mesmo na presença de um defeito, o sistema pode transmitir perfeitamente em qualquer comprimento de onda sob uma condição especial. Na equação 3.21, sendo $k = 0$, se $V + \alpha|T|^2 = 0$ então $t = 1$. Portanto, se a intensidade da onda incidente for $|R_0|^2 = -\frac{V}{\alpha}$ é possível ter transmissão unitária para qualquer k . Neste caso a não-linearidade cancela perfeitamente o efeito do potencial local do defeito.

Até aqui, os sistemas tratados apresentam simetria em relação à direção de transmissão da onda, ou seja, o coeficiente de transmissão de uma onda vindo da direita é o mesmo de uma onda vindo da esquerda. É o que chamamos de transmissão recíproca. Interessados em estudar as propriedades de transporte de um sistema assimétrico, Lepri e colaboradores [32] propuseram um modelo constituído de uma cadeia assimétrica não linear, localizada entre duas cadeias lineares, como mostrado na figura 3.7(a). Para o caso mais simples, isto é, cadeia assimétrica formada por dois sítios diferentes, os autores modelaram o sistema do mesmo modo que fizemos para o problema anterior, sendo $N = 2$, $V_1 \neq 0$ e $V_2 \neq 0$ e ainda $V_1 \neq V_2$.

Interagindo o mapa duas vezes para obterem ψ_0 e ψ_1 , encontram o coeficiente de transmissão da cadeia

$$t = \left| \frac{e^{ik} - e^{-ik}}{1 + (v - e^{ik})(e^{ik} - \delta)} \right|^2, \quad (3.22)$$

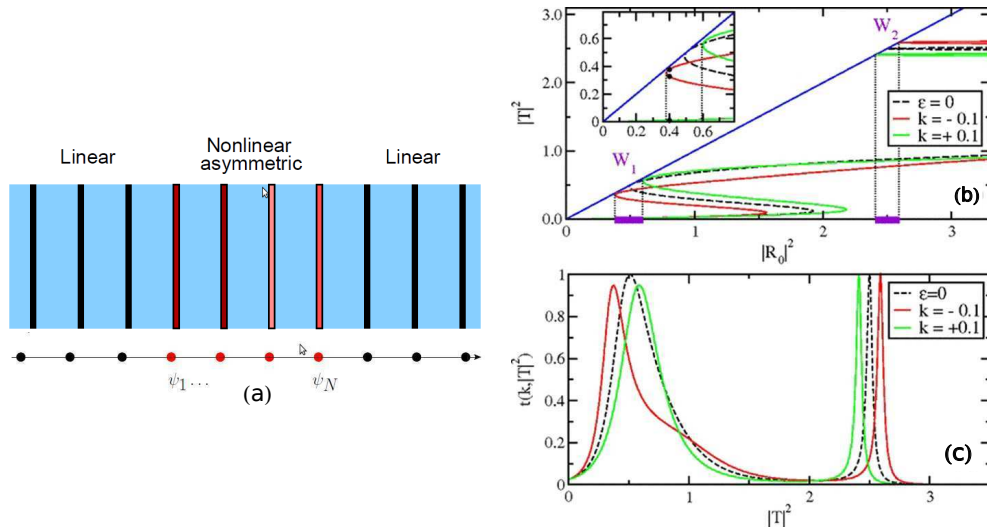
onde

$$\delta = V_2 - E + \alpha T^2 \quad e \quad v = V_1 - E + \alpha T^2 [1 - 2\delta \cos k + \delta^2]. \quad (3.23)$$

Um fato interessante que eles mostraram é que devido a presença de não linearidade e de assimetria $V_1 \neq V_2$ o comportamento da transmissão da esquerda para direita é diferente da transmissão da direita para esquerda, ou seja, o sistema apresenta um comportamento tipo diodo, como mostrado na figura 3.7. Sistemas que apresentam possibilidade de transporte não recíproco têm grande aplicação para o desenvolvimento de dispositivos tecnológicos, como já discutido nos capítulos anteriores. Mais especificamente, este exemplo mostra a possibilidade de realização experimental em sistemas fonônico e fotônico de camadas não lineares, bem como novas estratégias para controlar e otimizar a propagação de onda e projetar dispositivos de retificação da luz e do som [32].

É importante enfatizar que para o caso linear, $\alpha = 0$, o sistema não apresenta assimetria na transmissão, mesmo a cadeia sendo assimétrica. Isso pode claramente ser constatado observando as equações 3.23 para $\alpha = 0$, onde o produto $(v - e^{ik})(e^{ik} - \delta)$ na equação 3.22 é o mesmo independente da direção de propagação da onda. Portanto, o transporte não recíproco é um fenômeno de origem não linear e conseqüentemente depende da frequência e da amplitude

Figura 3.7: (a) Curvas obtidas para transmissão de uma onda através de uma cadeia não linear assimétrica sanduichada entre cadeias lineares. (b) Curva da transmissão mostram duas janelas onde o efeito diodo é máximo. (c) Coeficiente de transmissão como função da intensidade transmitida mostra o deslocamento dos picos de transmissão para transmissão pela direita ($k = -1$) e pela esquerda ($k = +1$) em relação ao caso simétrico ($\varepsilon = 0$).



Fonte: Lepri, 2011 [32]

da onda.

Uma vez que o transporte assimétrico neste tipo de modelo depende da não linearidade, é importante investigar como a saturação da resposta não linear influencia esta fenomenologia, o que, até onde temos conhecimento, não havia sido feito ainda. Como já discutido anteriormente, muitos trabalhos mostram que a saturação da não linearidade é responsável por fenômenos não triviais. Portanto a contribuição inédita do nosso trabalho é mostrar que embora a saturação da não linearidade torne o sistema mais linear (caso em que não temos transporte não recíproco), para certos valores da saturação o efeito diodo é favorecido. Além disso mostramos que a influência da saturação se dá de maneira diferente em comprimento de onda grande e pequeno, como será detalhado no próximo capítulo.

Além disso, investigaremos o transporte em sistemas com acoplamento não linear de três cadeias lineares, mostrando a possibilidade de realização de três tipos de portas lógicas dependendo da diferença de fase entre as ondas incidentes. O estudo deste tipo de sistema é muito importante pois existe o interesse do uso de estruturas de DNA tipo Y para o desenvolvimento de nanotecnologia. Este estudo será reportado no capítulo 5.

4

Influência da saturação da não linearidade no transporte não recíproco

Como foi discutido nos capítulos anteriores, a partir do sucesso obtido com a aplicação do diodo semicondutor na eletrônica, houve um grande interesse em investigar transporte não recíproco em outros tipos de sistemas como óptico, térmico e acústico. Entre as diversas maneiras de se quebrar a reciprocidade de um sistema, a combinação de não linearidade e assimetria tem sido explorada em diversos modelos como uma maneira simples e eficiente de se obter efeito diodo.

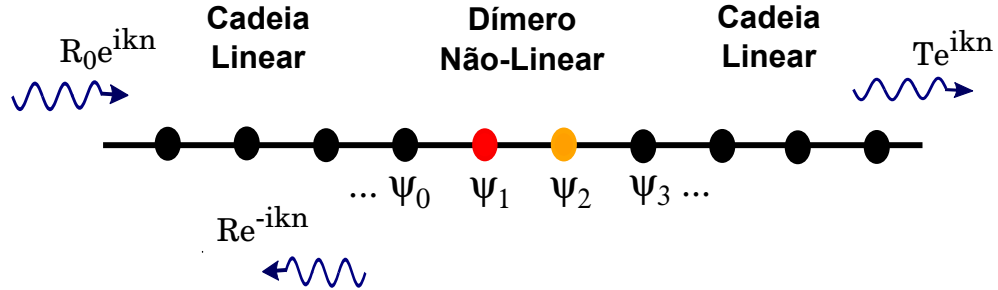
Embora a saturação da resposta não linear tenha efeitos não triviais sobre a dinâmica de ondas, sua influência ainda não havia sido investigada no contexto de transporte não recíproco. Portanto, neste capítulo, será estudada a transmissão assimétrica em uma cadeia discreta unidimensional e assimétrica com saturação na não linearidade. Usando a metodologia introduzida no capítulo 3, o sistema será modelado pela equação de Schrödinger discreta não linear (DNLS)¹ com coeficiente não linear dado por $\alpha_n \rightarrow \alpha_n / (1 + \beta |\psi_n(t)|^2)$. Mostraremos, entre outras coisas, que uma fraca saturação favorece a ação retificadora do sistema com elevada transmissão.

Para iniciar este estudo, na primeira seção será apresentado o modelo proposto e os cálculos feitos para encontrar o coeficiente de transmissão e o fator de retificação. Em seguida, serão discutidos os resultados, os quais estão divididos em duas partes. Na primeira parte será tratada a biestabilidade do sistema e as propriedades de transmissão não recíproca, enquanto que o efeito da saturação é investigado no comportamento do fator de retificação na segunda parte. Ainda apresentaremos uma análise da ação retificadora do sistema quando a assimetria ocorre na não linearidade. Por fim, os principais resultados serão resumidos na conclusão.

Os resultados discutidos aqui foram publicados na revista *Physical Review E* [100].

¹Abreviação do inglês: Discrete nonlinear Schrödinger

Figura 4.1: Esquema do sistema estudado. Dímero não linear acoplado a cadeias lineares. A energia on-site dos sítios do dímero são dadas por $V_1 = -2,625$, $V_2 = -2,375$ e são responsáveis pelas propriedades assimétricas do modelo. A energia potencial nos sítios lineares é nula. Apenas os sítios do dímero são não lineares, ou seja $\alpha \neq 0$.



Fonte: Autora, 2014

4.1 Modelo

A fim de estudar a influência da saturação da não linearidade no transporte assimétrico foi proposto um sistema constituído de um dímero ($V_1 \neq V_2$) não linear acoplado por ambos os lados em cadeias lineares semi-infinitas (sistema inspirado pelo modelo proposto por [32]). O esquema do modelo pode ser visto na figura 4.1. No dímero, a energia potencial dos sítios são dadas por $V_1 = -2,625$, $V_2 = -2,375$ e essa diferença nas energias é responsável pela característica assimétrica do modelo necessária para o transporte assimétrico. Nas cadeias lineares, a energia potencial de todos os sítios é nula.

Esse sistema é modelado pela DNLS 3.13, substituindo o coeficiente não linear simples por um coeficiente não linear com saturação da seguinte forma

$$\alpha_n \rightarrow \frac{\alpha_n}{1 + \beta |\psi_n(t)|^2}. \quad (4.1)$$

Observe que para $\beta |\psi_n(t)|^2 \ll 1$, recuperamos a não linearidade do tipo Kerr, ou seja, o sistema tem comportamento não linear padrão, enquanto que para $\beta |\psi_n(t)|^2 \gg 1$, o termo torna-se próximo de zero e o sistema tem comportamento linear.

Então, a DNLS estacionária definida para este problema é

$$E\psi_n = V_n\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1} + \frac{\alpha_n |\psi_n|^2}{1 + \beta |\psi_n(t)|^2} \psi_n, \quad (4.2)$$

onde $E = -2 \cos k$ é a relação de dispersão para um vetor de onda k , V_n é a energia on site, α_n é o coeficiente não linear e β é o parâmetro que controla a saturação da não-linearidade.

O coeficiente de transmissão para este sistema será obtido usando o mesmo método iterativo descrito no capítulo anterior, onde associando um mapa à equação de Schrödinger e

conhecendo a função de onda no sítio $n + 1$ é possível encontrar a função no sítio n . Para este problema podemos escrever

$$\Psi_{n-1} = -\Psi_{n+1} + \left(V_n - E + \frac{\alpha_n |\Psi_n|^2}{1 + \beta |\Psi_n(t)|^2} \right) \Psi_n. \quad (4.3)$$

A função de onda à esquerda e à direita do dímero é dada pela equação 3.15, aqui $N = 2$. Portanto

$$\Psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 1, \\ T e^{ikn}, & n \geq 2. \end{cases} \quad (4.4)$$

Manipulando as funções de onda Ψ_0 e Ψ_1 obtidas a partir da equação 4.4, é fácil encontrar a relação para a intensidade da onda incidente em função das mesmas,

$$R_0 = \frac{\Psi_0 e^{-ik} - \Psi_1}{e^{-ik} - e^{ik}}. \quad (4.5)$$

Essas funções podem ser encontradas a partir da interação da equação 4.3 conhecendo $\Psi_2 = e^{2ik}$ e $\Psi_3 = e^{3ik}$. Assim

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= -T e^{2ik} + \left(V_1 - E + \frac{\alpha_1 |\Psi_1|^2}{1 + \beta |\Psi_1|^2} \right) \Psi_1 \\ \Psi_1 &= T e^{2ik} \left(V_2 - E + \frac{\alpha_2 |T|^2}{1 + \beta |T|^2} - e^{ik} \right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Substituindo 4.6 em 4.5 e com o pouco de álgebra chega-se ao coeficiente de transmissão

$$t = \left| \frac{T}{R_0} \right|^2 = \left| \frac{e^{ik} - e^{-ik}}{1 + (v - e^{ik})(e^{ik} - \delta)} \right|^2. \quad (4.7)$$

onde

$$v = V_1 - E + \frac{\alpha_1 |T|^2 [1 - 2\delta \cos k + \delta^2]}{1 + \beta |T|^2 [1 - 2\delta \cos k + \delta^2]} \quad e \quad \delta = V_2 - E + \frac{\alpha_2 |T|^2}{1 + \beta |T|^2} \quad (4.8)$$

Os cálculos feitos até aqui foram para uma onda incidindo pela esquerda do dímero. Para calcular o coeficiente de transmissão de uma onda incidindo pela direita basta trocar a posição dos sítios 1 e 2 e repetir o procedimento.

Uma vez obtidos os coeficientes de transmissão de uma onda vinda da esquerda t_E e da direita t_D é possível calcular o fator de retificação. Essa grandeza caracteriza o comportamento não recíproco do sistema e é obtida pela diferença relativa entre os coeficientes de transmissão de uma onda vindo da esquerda e da direita, ou seja,

$$f(k, |T|^2) = \frac{t_E(k, |T|^2) - t_D(k, |T|^2)}{t_E(k, |T|^2) + t_D(k, |T|^2)}. \quad (4.9)$$

O valor máximo do coeficiente de retificação é ± 1 , a qual ocorre quando a ação de retifica-

ção é perfeita, isto é, o sistema transmite muito por um lado e não transmite pelo outro. Quanto maior for a assimetria do sistema, maior será o fator de retificação. Porém a transmissão pode não ser tão eficiente. Logo, estamos interessados em sistemas com grande ação de retificação, mas também alta transmissão, por isso será usado uma condição de fraca assimetria.

A seguir será mostrado o comportamento do coeficiente de transmissão para uma onda incidindo por ambos os lados da cadeia. Destacando as regiões e condições onde há diferença entre esses coeficientes.

4.2 Biestabilidade e saturação da resposta não linear

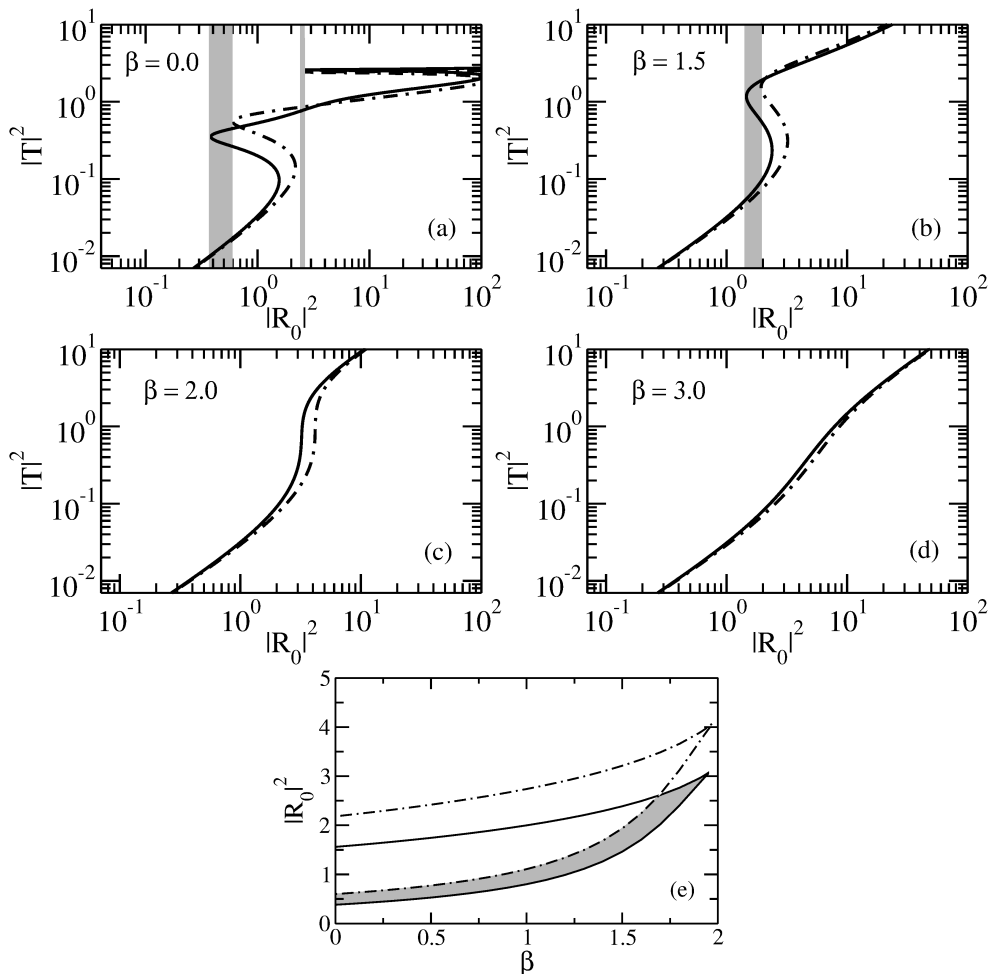
A partir do cálculo do coeficiente de transmissão para uma onda incidindo pela esquerda do sistema (sentido direto, linha tracejada nos gráficos) e depois incidindo pela direita (sentido inverso, linha contínua nos gráficos) construímos o gráfico que mostra a relação entre a intensidade da onda incidente e a intensidade da onda transmitida para diferentes valores de saturação, como mostrado na figura 4.2, obtida para $k = 0,1$.

Para o caso de saturação nula ($\beta = 0$), ou seja, o sistema com não linearidade cúbica, observamos a existência de duas janelas de biestabilidade, que são regiões onde um valor de intensidade da onda incidente pode apresentar diferentes intensidades transmitidas. Dependendo da direção de incidência da onda é possível notar um pequeno deslocamento entre essas janelas. Na primeira janela de biestabilidade a onda que incide pela direita já possui transmissão para intensidade de incidência menor em relação a onda que incide pela esquerda (observe a região sombreada mais larga). Portanto, para intensidade de incidência nessa região podemos dizer que há transmissão para onda vindo da direita e não temos transmissão para onda vinda da esquerda, ou seja, temos transporte não recíproco. Na segunda janela de biestabilidade, o efeito é invertido. Tem-se transmissão da onda vinda da esquerda e não temos para ondas vindas da direita do sistema para intensidades de incidência localizadas na estreita faixa de região sombreada.

A medida que aumentamos a saturação da resposta não linear, a biestabilidade do sistema é suprimida, pois o sistema torna-se linear, como mostrado na figura 4.2 (b)-(d). Entretanto, uma pequena assimetria entre as transmissões das ondas vindo pela direita e pela esquerda persiste, mesmo na ausência de biestabilidade fig. 4.2(d). Portanto, podemos concluir que a ação de retificação do sistema diminui com o aumento da saturação da não linearidade.

Na figura 4.2(e) mostramos a variação da extensão da primeira janela de biestabilidade em função da saturação para ondas de vetor de onda $k = 0,1$ vindas de ambos os sentidos, direita para esquerda e esquerda para direita. Podemos ver claramente que a região de biestabilidade diminui a medida que aumentamos a saturação ao mesmo tempo que sofre um deslocamento

Figura 4.2: Comportamento da biestabilidade em função da saturação da não linearidade. (a)-(d) Relação entre intensidade de onda transmitida e onda incidente para valores distintos da saturação β e vetor de onda $k = 0,1$. Regiões de biestabilidade apresentam diferença para incidência pela direita (linha sólida) e pela esquerda (linha pontilhada) o que indica regime de transmissão não recíproca (representado pelas faixas cinzas). O aumento da saturação suprime a ação retificadora do sistema. (e) Curva delimita a extensão da primeira janela de biestabilidade para incidência pela direita (linha sólida) e pela esquerda (linha pontilhada) como função do coeficiente de saturação β . Área sombreada representa regime com potencial para ação de retificação.

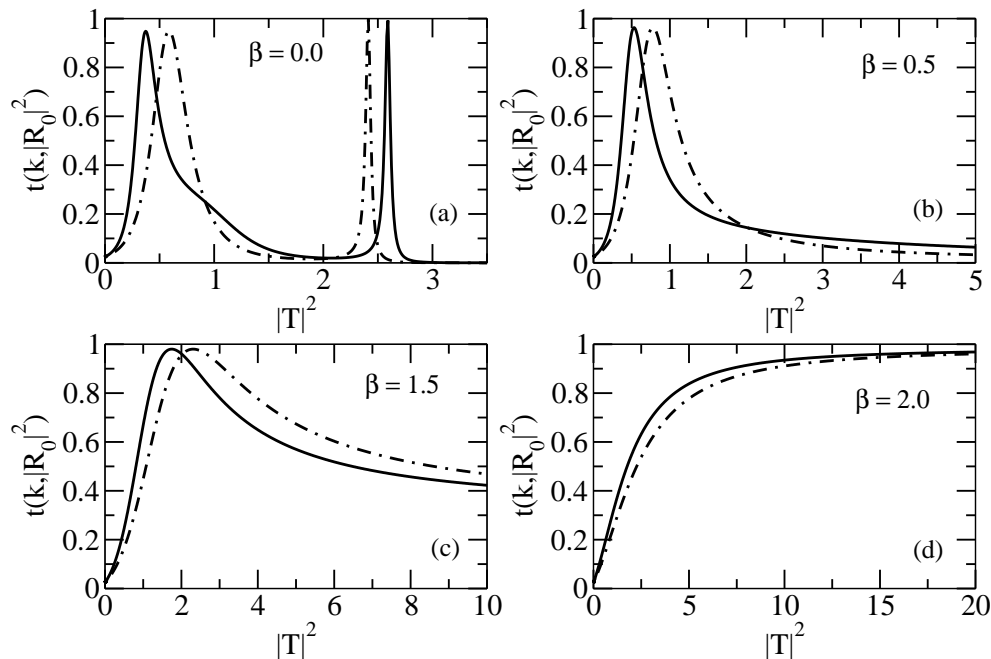


Fonte: Autora, 2014

para maiores intensidade da onda incidente. A região sombreada representa o regime com potencial para desenvolvimento de dispositivos tipo diodo.

Interessados em conhecer a eficiência da transmissão através do sistema, investigamos o coeficiente de transmissão como função da intensidade de onda transmitida $|T|^2$ para incidência pela direita e pela esquerda de ondas com vetor de onda $k = 0,1$ e diferentes valores de saturação. O resultado pode ser visualizado na figura 4.3. Na ausência de saturação ($\beta = 0$) o sistema apresenta dois picos de transmissão os quais correspondem às regiões de biestabilidade. Note que na primeira janela o pico de transmissão para onda que vem pela direita (linha sólida) ocorre

Figura 4.3: Curva do coeficiente de transmissão como função da intensidade da onda transmitida obtida para distintos valores do coeficiente de saturação β para ondas inseridas pela direita (linha sólida) e pela esquerda (linha pontilhada) e vetor de onda $k = 0, 1$. (a)-(d) Os picos do coeficiente de transmissão representam as janelas de biestabilidade e conseqüentemente as regiões de transmissão não recíproca. Os picos deslocam e desaparecem com o aumento da saturação da não linearidade. Elevado valor do coeficiente de transmissão indica boa eficiência no transporte através do sistema.

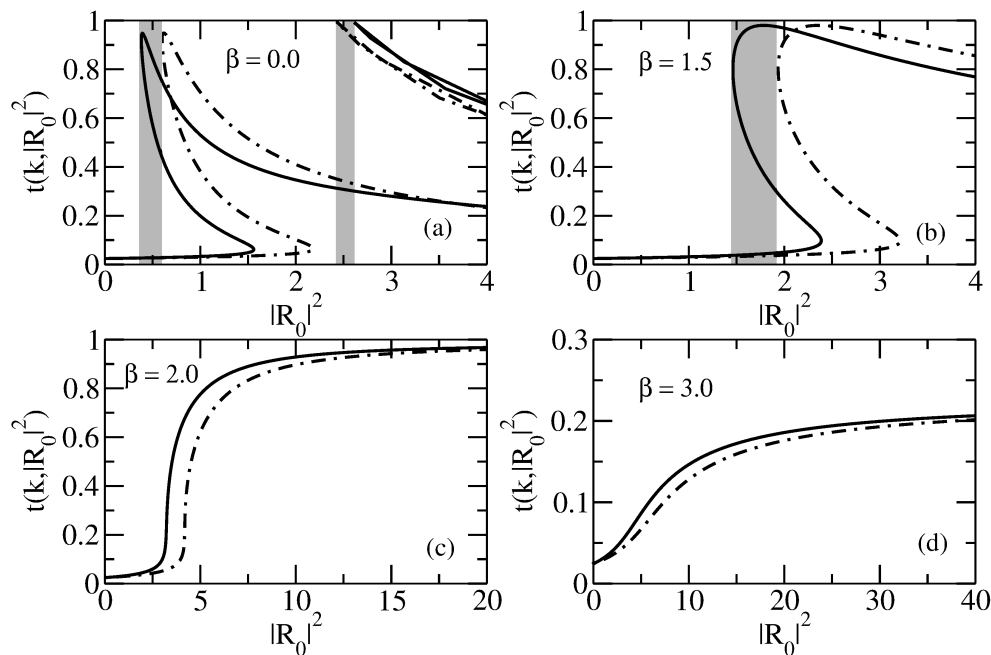


Fonte: Autora, 2014

daprimero do que o pico de transmissão para onda que incide pela esquerda (linha tracejada), enquanto que na segunda janela o processo é invertido, o que está em concordância com o que foi discutido anteriormente. Quando o coeficiente de saturação aumenta, os picos de transmissão se deslocam para altas intensidades de onda transmitida e desaparecem. Deste modo, para grandes valores do coeficiente β a curva de transmissão torna-se monotônica devido à ausência de biestabilidade. Note que o sistema apresenta, para certos valores de intensidade transmitida, coeficiente de transmissão próximos de 1, o que indica que praticamente toda onda incidente é transmitida e portanto, o sistema possui transmissão eficiente nestas regiões, característica importante para aplicação em dispositivos.

Para melhor visualização do efeito da saturação na transmissão não recíproca devemos analisar a relação entre o coeficiente de transmissão como função da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$ como mostrado na figura 4.4. Para $\beta = 0$, ou seja, ausência de saturação, é possível observar claramente uma diferença na transmissão da onda incidentes pela direita (linha sólida) e pela esquerda (linha pontilhada). Na primeira região destacada de cinza, vemos que o coeficiente de transmissão da onda vinda da direita é grande (muito próximo de um) enquanto que o coeficiente de transmissão da onda vinda da esquerda é praticamente nulo, isso garante

Figura 4.4: Curva do coeficiente de transmissão como função da intensidade de onda incidente obtida para distintos valores do coeficiente de saturação β para ondas inseridas pela direita (linha sólida) e pela esquerda (linha pontilhada) e vetor de onda $k = 0,1$. (a) Regiões destacadas em cinza mostram intensidades de incidência com ação de retificação e bom contraste entre coeficientes de transmissão da onda vindo pela direita e pela esquerda, principalmente na primeira janela. (b) Valores intermediários da saturação favorece o aumento da região com transporte não recíproco sem comprometer o contraste entre os dois sentidos de propagação. (c) e (d) Valores elevados da saturação inibem a biestabilidade do sistema, o que suprime o efeito tipo diodo.

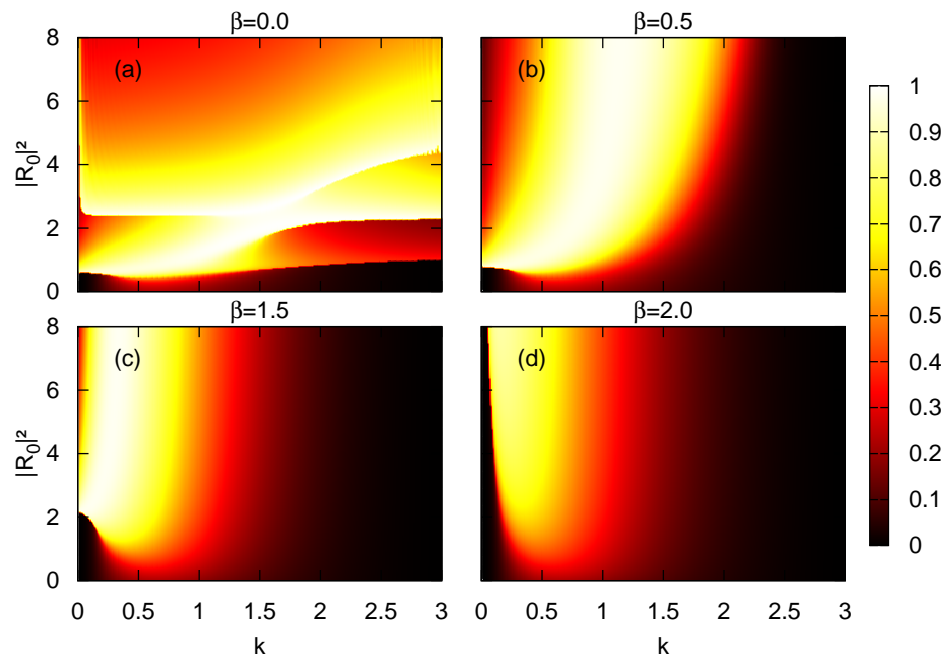


Fonte: Autora, 2014

um ótimo efeito de retificação. Na segunda região destacada, o coeficiente de transmissão é maior para onda vinda da esquerda, porém o contraste entre os dois sentidos de propagação é menor quando comparado à primeira região. Quando o valor da saturação aumenta, a região com comportamento tipo diodo sofre um aumento sem contudo comprometer o coeficiente de transmissão, figura 4.4(b). Para valores ainda maiores da saturação, a biestabilidade é suprimida e portanto não detectamos ação de retificação.

Até aqui foi mostrada a influência da saturação da resposta não linear para a propagação de ondas através de um dímero apenas para grande comprimento de onda (vetor de onda pequeno). A fim de se ter uma investigação completa quanto a esta ação sobre pequenos comprimentos de onda, mostramos através de um gráfico de cores a relação entre o coeficiente de transmissão, o vetor de onda k e a intensidade da onda incidente $|R_0|^2$. A figura 4.5 foi obtida para uma onda incidindo pela esquerda, mas um gráfico similar é obtido para incidência a partir da direita apenas com as bandas um pouco deslocadas. As áreas de biestabilidade são aquelas de maior coeficiente de transmissão. Para o caso de não linearidade não saturada, figura 4.5(a), são visualizadas duas regiões de alta transmissão, para pequeno e grande vetores onda, ambas com dois

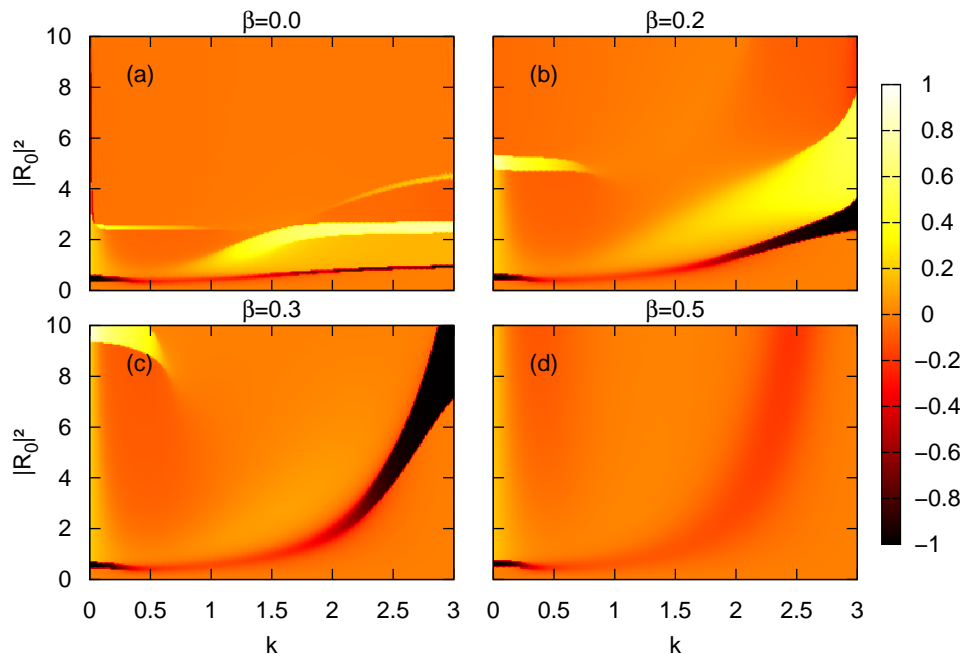
Figura 4.5: Gráfico de cores do coeficiente de transmissão da onda como função do vetor de onda k e da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$. Figura obtida para uma onda inserida pela esquerda do dímero assimétrico não linear para diferentes valores do coeficiente de saturação β . Na ausência de saturação, vetores de onda pequenos e grandes possuem dois picos de transmissão, os quais se sobrepõem em vetores de onda intermediários. Na presença de saturação e em maiores intensidades da onda incidente, o sistema possui uma banda de transmissão que diminui e se desloca para menores comprimentos quando aumenta a saturação.



Fonte: Autora, 2014

picos de transmissão. Estas regiões se fundem para vetores de ondas intermediários. Quando a saturação da não linearidade é levada em conta, o comportamento do sistema para baixa intensidade de incidência não sofre modificação se comparado com o caso não saturado. Isso acontece porque os efeitos da saturação para baixa intensidade são insignificantes. No entanto, quando a intensidade de incidência aumenta a transmissão para pequenos e grandes vetores de ondas apresenta comportamento diferente do caso não saturado. O sistema exibe uma simples banda de transmissão em torno dos valores menores do vetor de onda. Isso acontece porque a medida que se aumenta a saturação da resposta não linear do sistema, o mesmo torna-se efetivamente linear e, portanto, a transmissão não depende mais da intensidade da onda incidente. Note ainda que, a medida que ocorre o aumento da saturação, a banda se desloca em direção a vetores de onda menores.

Figura 4.6: Gráfico de cores do fator de reificação f como função do vetor de onda k e da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$ para distintos valores do parâmetro de saturação β . A ação de retificação é menos pronunciada em vetores de onda intermediários. Quando a saturação aumenta, as regiões de retificação positiva e negativa apresentam comportamento diferente para comprimentos de onda pequenos e grandes.



Fonte: Autora, 2014

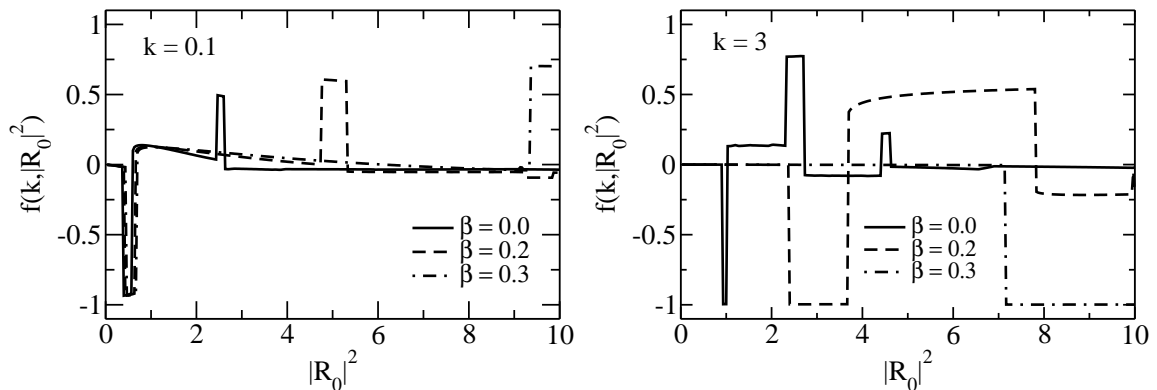
4.3 Efeito de saturação na ação de retificação

Depois que mostramos que o transporte não recíproco está associado à presença de biestabilidade, e que esta é suprimida pelo aumento da saturação da resposta não linear, vamos entender melhor como essa saturação influencia na ação de retificação do dímero não linear. O efeito tipo diodo é caracterizado pela ocorrência de elevada transmissão em um sentido e ausência (ou pouca) de transmissão no outro. Para quantificar isso, calculamos o fator de retificação f , dado pela equação 4.9.

Na figura 4.6 retratamos o fator de retificação como função do vetor de onda k e da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$ para diferentes valores da saturação β . Nas regiões que exibem biestabilidade, o fator de retificação é calculado considerando o modo de maior coeficiente de transmissão em cada direção. Note que a figura retrata o regime de baixa saturação, pois anteriormente foi mostrado que para grande saturação o sistema não exibe diferença substancial entre o transporte feito pela direita e pela esquerda.

Na ausência de saturação, figura 4.6(a), podem ser vistas faixas onde o fator de retificação é positivo (faixas claras) e negativo (faixas escuras), tanto para comprimentos de onda grandes quanto pequenos, embora uma faixa maior de retificação esteja localizada na região de grande

Figura 4.7: Fator de retificação f como função da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$ para distintos valores do parâmetro de saturação β . (a) Para pequeno valor do vetor de onda $k = 0,1$ a extensão da intensidade do comportamento biestável aumenta com a saturação para ambas as janelas. Para a primeira janela, o fator de retificação decresce levemente com o aumento da saturação. Na segunda janela o comportamento é contrário, o fator de retificação aumenta. Os saltos no sinal de f são devidos ao comportamento biestável para incidência pela direita e pela esquerda. (b) Para grande valor do vetor de onda $k = 3,0$ o valor do fator de retificação não depende da saturação na primeira janela de biestabilidade, enquanto que na segunda janela este valor é suprimido pela saturação.



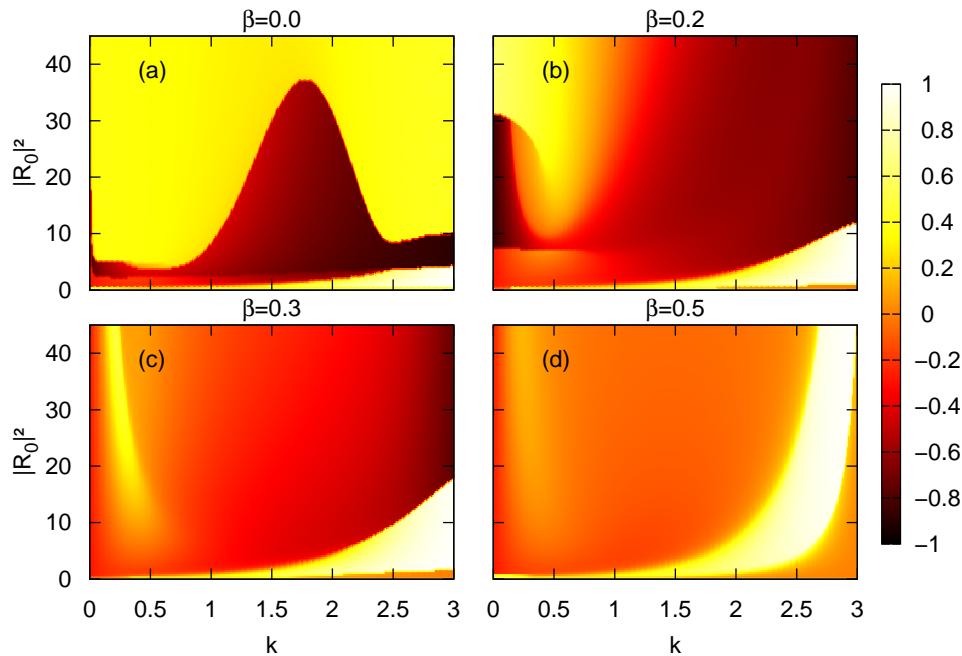
Fonte: Autora, 2014

vetor de onda. A ação de retificação não é tão pronunciada para vetores de onda intermediários. A saturação afeta de maneira distinta o fator de retificação para comprimento de onda grande e pequeno, figura 4.6(b)-(d). Para pequeno valor de k , a faixa de valores negativos de f (significando transporte eficiente da direita para esquerda) é fracamente afetada pela saturação, enquanto que a faixa de valores positivos de f (significando transporte eficiente da esquerda para direita) é fortemente deslocada para intensidade de incidência maiores e torna-se mais larga. Para grande valor de k , a faixa de retificação negativa sofre forte influência da saturação, tornando-se mais larga e deslocando-se para intensidades maiores quando a saturação aumenta. Por outro lado, a faixa de retificação positiva torna-se mais fraca para valores maiores do parâmetro β .

Para visualizar melhor o comportamento descrito acima, vamos exibir gráficos do fator de retificação f como função da intensidade de incidência $|R_0|^2$ para vetor de onda pequeno, $k = 0,1$ (figura 4.7(a)) e para vetor de onda grande, $k = 3,0$ (figura 4.7(b)).

Na figura 4.7(a), para $k = 0,1$, constata-se que o fator de retificação negativo sofre apenas uma pequena redução quando a saturação aumenta, permanecendo muito próximo da unidade. Nota-se também que a faixa de intensidade onde ocorre o efeito de retificação também é pouco deslocada. Isso indica que a ação de retificação neste contexto sofre pouco a influência da saturação. O mesmo não acontece para o fator de retificação positivo, onde a intensidade em que ocorre o efeito diodo desloca-se e alarga-se a medida que a saturação aumenta. Além disso o fator de retificação também aumenta com a saturação, mas não chega próximo da unidade.

Figura 4.8: Fator de retificação f como função do vetor de onda k e da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$ para distintos valores do parâmetro de saturação β para o caso de assimetria na não linearidade. A ação de retificação ocorre para vetores de onda maiores (regiões mais claras e mais escuras).

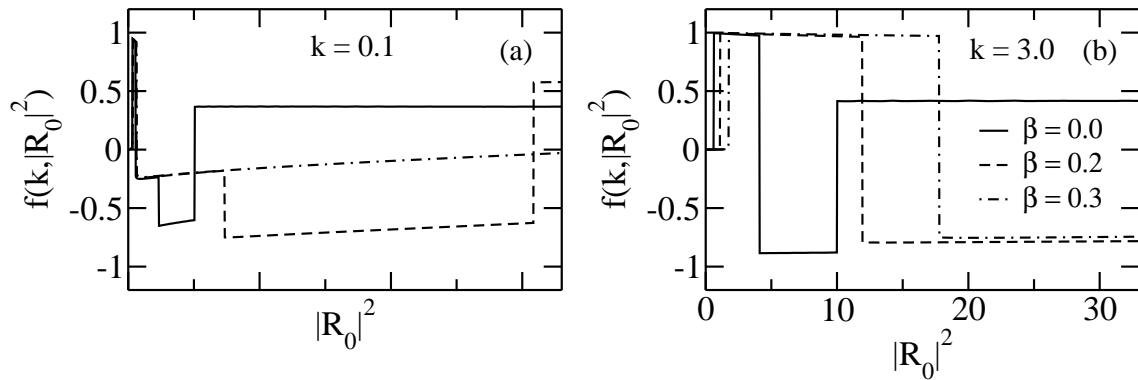


Fonte: Autora, 2014

Pela observação da figura 4.7(b), $k = 0,3$, é possível concluir que tanto o fator de retificação negativo quanto o positivo são fortemente afetados pela saturação, já que a intensidade onde ocorrem são deslocadas e suas faixas de ocorrência tornam-se mais largas quando eleva-se o valor da saturação. No entanto, para fator de retificação negativo, seu valor permanece próximo da unidade, o que indica uma transmissão eficiente da direita para esquerda, enquanto que o valor diminui com o aumento da saturação para o fator de retificação positivo. Os resultados apresentados até aqui, mostram o efeito da saturação na transmissão não recíproca de um dímero não linear baseado na combinação de não linearidade e assimetria espacial para quebrar a reciprocidade do sistema. Neste caso, a assimetria foi gerada pela diferença de energia potencial dos sítios do dímero e a não linearidade foi a mesma para ambos. No entanto achamos interessante investigar o que acontece com a ação retificadora do sistema se a assimetria for gerada por uma diferença na não linearidade de cada sítio, enquanto que suas energias on-site permanecem iguais.

Para este estudo, assumimos que as energia dos sítios são iguais e o valor dado por $V_1 = V_2 = -2,5$ e que a não linearidade em cada sítio é diferente sendo $\alpha = 0,5$ e $\alpha = 1,5$. A partir disso calculamos o fator de retificação e estabelecemos sua relação como função do vetor de onda e da intensidade de incidência para distintos valores da saturação, como mostrado na figura 4.8.

Figura 4.9: Fator de retificação f como função da intensidade da onda incidente $|R_0|^2$ para distintos valores do parâmetro de saturação β para o caso de assimetria na não linearidade. (a) Em $k = 0,1$ o fator de retificação apresenta valores intermediários tanto para fator positivo quanto negativo. (b) Em $k = 3,0$, o fator de retificação é quase perfeito em ambos os sentidos e sofre aumento e deslocamento para maiores intensidade de incidência quando a saturação da resposta da não linearidade aumenta.



Fonte: Autora, 2014

Com a assimetria na não linearidade, a ação de retificação se apresenta para valores maiores da intensidade de incidência da onda quando comparada com o caso de assimetria na energia potencial. Isso acontece porque a assimetria da não linearidade é relevante apenas nos termos de alta ordem. Na ausência de saturação, $\beta = 0$, temos transmissão predominante da onda vinda da direita para todos os valores de k , porém ela abrange maior faixa de incidência para vetores de onda intermediários e o maior efeito de retificação se dá em vetores de onda maior de intensidade menor (região mais escura). A transmissão predominante para onda vindo da esquerda ocorre para vetores de onda grande e pequeno, porém em intensidade de incidência maiores e o efeito de retificação é maior para vetores de onda grande (região quase branca). Para visualizar melhor o papel da saturação sobre este efeito observe a figura 4.9.

Para pequeno vetor de onda, figura 4.9(a), a ação de retificação não é eficiente, pois os valores do fator de retificação são intermediários tanto para incidência pela direita quanto pela esquerda. Por outro lado, para grande vetor de onda, figura 4.9(b), o fator de retificação é quase perfeito para ambas as direções de incidência. O aumento da saturação desloca a região de retificação para regiões de maiores intensidades de incidência.

Em resumo, neste trabalho estudamos a influência da resposta não linear na transmissão não recíproca de um sinal harmônico através de um dímero não linear acoplado em ambos os lados a cadeias lineares. Usamos equações de Schrödinger não linear discretas para modelar a transmissão e por meio de um processo de mapa encontramos analiticamente o coeficiente de transmissão e o fator de retificação como função do vetor de onda incidente e da intensidade transmitida. Mostramos que o comportamento biestável favorece uma ação de retificação e a mesma é suprimida na presença de forte saturação, pois o dímero comporta-se efetivamente

como um sistema linear neste regime. Entretanto uma fraca saturação tem uma influência positiva sobre a transmissão não recíproca. Primeiramente, ela alarga a faixa de intensidades onde biestabilidade ocorre, deixando a ação de retificação mais robusta contra variações na intensidade da onda incidente. Na primeira faixa de intensidades que exhibe efeito retificador, a saturação não compromete o contraste entre as transmissões com incidência à esquerda e à direita. Para ondas com grandes comprimentos de onda (pequenos valores de k), a primeira faixa de retificação é apenas levemente afetada pela saturação da resposta não linear, enquanto o fator de retificação decresce na segunda faixa que é substancialmente alargada e deslocada para maiores intensidades da onda incidente. Para ondas de pequeno comprimento de onda, a saturação desloca e alarga as faixas de retificação. Contudo, enquanto o fator de retificação permanece praticamente unitário na primeira faixa, ele é fortemente reduzido nas faixas subsequentes. Desta forma, podemos concluir que a primeira faixa de retificação é a mais adequada para explorar a ação tipo diodo. Uma fraca saturação, resultante da contribuição de não linearidades de mais alta ordem, leva a uma faixa mais larga de intensidades da onda incidente onde o fator de retificação permanece grande tanto para pequenos como para altos comprimentos de onda.

5

Portas Lógicas controladas por mudança de fase em cadeias não lineares

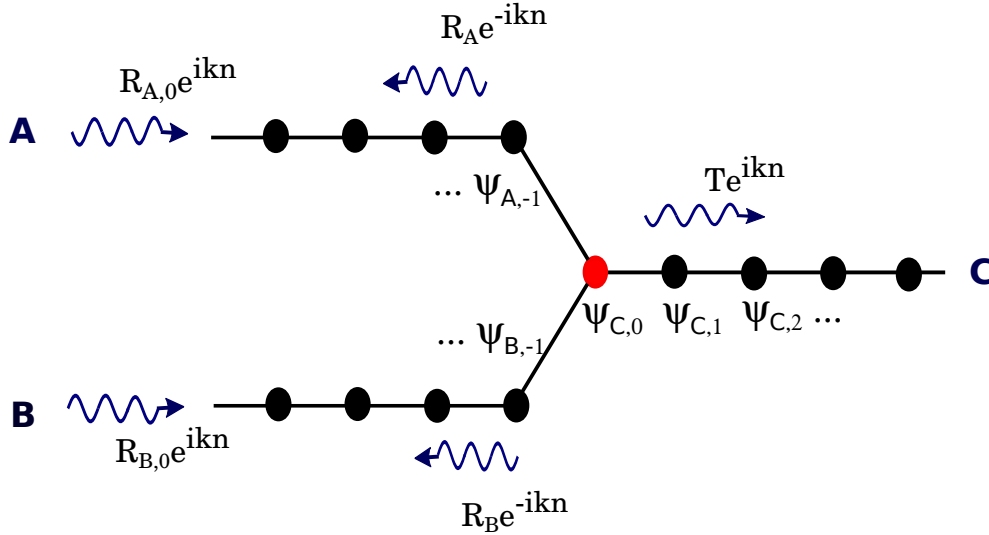
Depois de estudarmos a influência da saturação da não linearidade no comportamento tipo diodo em uma cadeia discreta unidimensional assimétrica formada pelo acoplamento de duas cadeias lineares semi-infinita, queremos agora investigar as propriedades de transmissão de um sistema quase-unidimensional construído pelo acoplamento não linear de três cadeias lineares semi-infinitas, sendo duas delas canais de entrada e a outra, um canal de saída. Este tipo de estrutura emula geometrias de nanotubos de carbono e junções de DNA na forma de Y, as quais são interessantes para o desenvolvimento de dispositivos nanobiotecnológicos.

Neste trabalho, iremos explorar a capacidade desta estrutura na forma de Y de realizar funções lógicas. Em particular, estamos interessados em mostrar como uma diferença de fase entre as ondas incidentes neste sistema pode ser usada para se obter diferentes tipos de portas lógicas. Para isso o sistema será modelado por um conjunto de Equações de Schrödinger discretas não lineares, cujas soluções nos permitirão encontrar o coeficiente de transmissão do sistema. Usando um esquema de digitalização baseado na modulação da amplitude do sinal de saída iremos mostrar que o sistema permite a realização de portas lógicas do tipo AND, OR e XOR. A não linearidade favorece a realização de algumas portas em regiões de grande comprimento de onda. Além disso, a análise do contraste irá mostrar que ela também favorece um melhor desempenho das operações lógicas sob certas condições.

Na primeira seção deste capítulo será apresentado o modelo proposto e o formalismo usado para encontrar o coeficiente de transmissão. Em seguida, serão discutidos os resultados obtidos a partir do cálculo do espectro de transmissão e as relações entre a diferença de fase e não linearidade. Ao final, apresentaremos um resumo e nossas principais conclusões.

Os resultados discutidos aqui foram publicados na revista *Physical Review E* [100].

Figura 5.1: Esquema do sistema estudado. Duas cadeias lineares semi-infinitas de entrada A e B encontram-se no sítio não linear (em vermelho) e são acopladas a uma cadeia C de mesmas características. A energia on site é não nula apenas no sítio não linear.



Fonte: Autora, 2015

5.1 Modelo

Para explorar a capacidade de estruturas tipo Y realizarem operações lógicas, nós iremos investigar as propriedades de transmissão em um sistema constituído de duas cadeias semi-infinitas A e B que estão acopladas a outra cadeia C por meio de um sítio não linear, como mostrado na figura 5.1.

Em uma aproximação tight-binding, as amplitudes de ondas estacionárias nas cadeias lineares são descritas por equações de Schrödinger discretas na forma

$$E\psi_{j,n} = -\psi_{j,n-1} - \psi_{j,n+1}, \quad (5.1)$$

onde $j = A, B, C$ distinguem as cadeias semi-infinitas, $n < 0$ refere-se às cadeias de entrada e $n > 0$ à cadeia de saída. O sítio $n = 0$ é compartilhado por todos os canais, de modo que $\psi_{A,0} = \psi_{B,0} = \psi_{C,0} = \psi_0$. Nos sítios das cadeias de entrada e saída, a energia potencial é nula e a energia de hopping será considerada unitária. A relação de dispersão é dada por $E = -2\cos k$.

No sítio não linear, a amplitude da função de onda satisfaz a equação de Schrödinger discreta não linear na forma

$$E\psi_n = V_0\psi_0 - \psi_{A,-1} - \psi_{B,-1} - \psi_{C,+1} + \alpha|\psi_0|^2\psi_0, \quad (5.2)$$

onde α é o parâmetro não linear, V_0 é a energia on-site do sítio não linear.

Para encontrar o coeficiente de transmissão seguiremos a mesma metodologia introduzida

no capítulo 3, respeitando as particularidades deste sistema. Sabemos que quando ondas planas, de vetor de onda k , são inseridas através das cadeias A e B, elas sofrem espalhamento ao atingir o sítio não linear, de maneira que as amplitudes das funções de onda podem ser escritas da seguinte maneira

$$\Psi_{j,n} = \begin{cases} R_{j,0}e^{ikn} + R_j e^{-ikn}, & n \leq 0, \\ T e^{ikn}, & n \geq 0. \end{cases} \quad (5.3)$$

sendo $j = A, B$, $R_{j,0}$ e R_j as amplitudes de onda incidente e refletida, respectivamente, nos canais de entrada. T é a amplitude da onda transmitida para o canal de saída C (veja a figura 5.1).

Analisaremos duas situações: na primeira delas calculamos o coeficiente de transmissão quando apenas uma onda de amplitude R_0 é inserida no sistema, independente do canal de entrada. Em seguida, repetiremos os cálculos para o caso de duas ondas serem inseridas no sistema. Neste caso, assumimos que as amplitudes de incidência tenham sempre o mesmo valor, ou seja, $|R_{A,0}| = |R_{B,0}| = |R_0|$, porém possuam uma diferença de fase, de modo que $R_{B,0} = R_{A,0}e^{i\Delta\phi}$. Assim como fizemos nos problemas anteriores, é possível obter uma expressão para R_0 a partir de manipulações usando as funções de onda ψ_{-1} e ψ_0 encontradas a partir a equação 5.3. Então

$$R_0 = \frac{\psi_{-1}e^{-ik} - 2\psi_0}{\xi(e^{-ik} - e^{ik})}. \quad (5.4)$$

Aqui o parâmetro ξ foi introduzido para generalizar a expressão para o caso de incidência por apenas um canal, quando então $\xi = 1$ ou incidência pelos dois canais e neste caso $\xi = 1 + e^{i\Delta\phi}$.

A função de onda no sítio não linear pode ser obtida usando o mapa recursivo, de maneira que

$$\psi_{-1} = -\psi_1 + (V_0 - w + \alpha|T|^2)\psi_0, \quad (5.5)$$

sendo $\psi_0 = T$ e $\psi_1 = T e^{ik}$ obtidas a partir da equação 5.3.

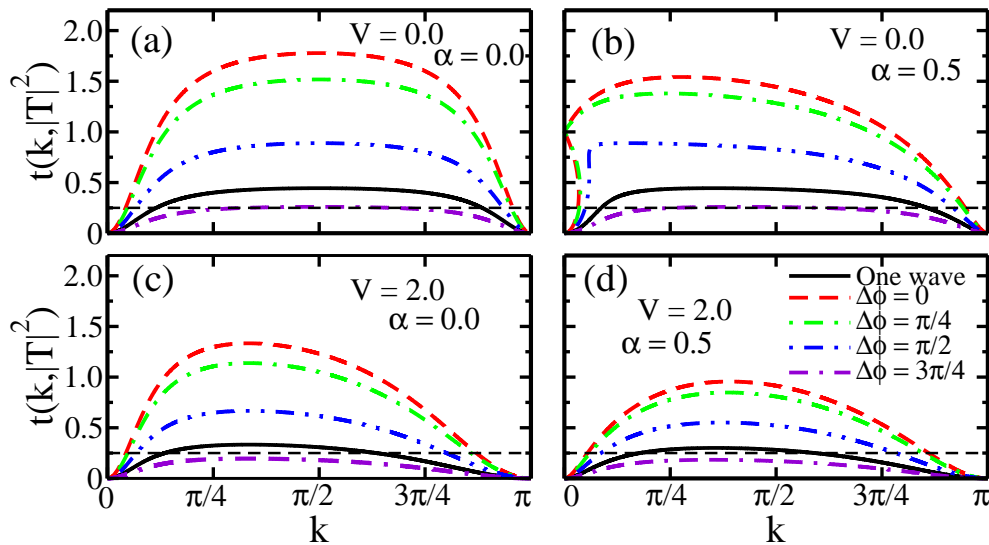
É importante chamar a atenção para o fato que se houver apenas uma onda incidente $\psi_{-1} = \psi_{j,-1}$, onde $j = A$ ou B , mas se forem duas ondas incidentes, então $\psi_{-1} = \psi_{A,-1} + \psi_{B,-1}$. Então, substituindo a equação 5.5 em 5.4 temos o coeficiente de transmissão para um sistema com estrutura tipo-Y dado por

$$t = \left| \frac{T}{R_0} \right|^2 = \left| \frac{\xi(e^{ik} - e^{-ik})}{v - 3e^{ik}} \right|^2. \quad (5.6)$$

onde $v = V_0 - E + \alpha|T|^2$.

Para estudar a possibilidade de funções lógicas usando este modelo, consideramos que temos bit 1 como sinal lógico de entrada quando temos onda inserida nos canais de entrada e bit 0 quando não houver onda, de modo que se uma onda for inserida apenas na entrada A, a informação lógica é (1,0), se for apenas no canal B teremos (0,1) e se ondas forem inseridas nos

Figura 5.2: Coeficiente de transmissão como função do vetor de onda para energia on-site nula e diferente de zero, para o caso linear e não linear. A linha preta sólida corresponde à entrada de onda em um único canal. As linhas pontilhadas coloridas são para os casos de entrada pelos dois canais com diferença de fase entre as ondas incidentes. A transmissão de referência é indicada pela linha preta tracejada. Em valores intermediários de k , o coeficiente de transmissão é máximo e diminui para zero em $k = 0$ e $k = \pi$. O acoplamento através de um sítio não linear com pequena energia on site pode apresentar biestabilidade com modo de transmissão $t \neq 0$ em $k = 0$. Esta característica dá origem a operações lógicas em k pequeno que não são possíveis em cadeias acopladas linearmente.



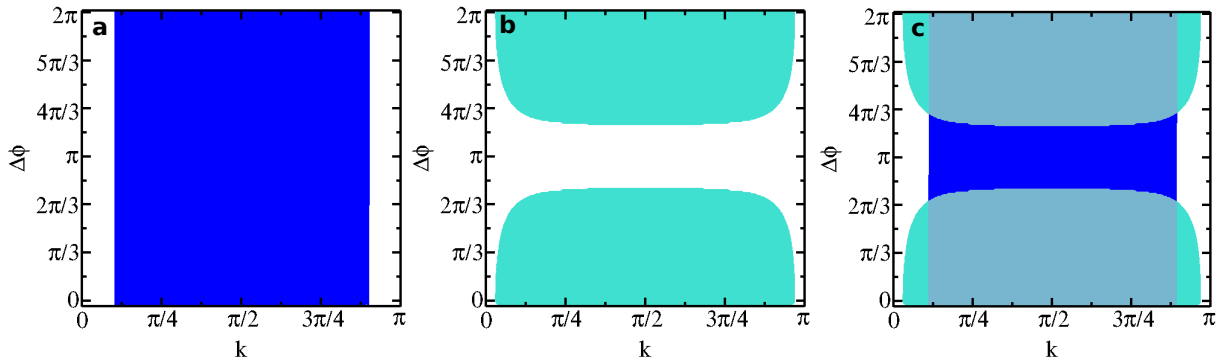
Fonte: Autora, 2015.

dois canais, informação lógica do tipo (1,1). O esquema de digitalização para o sinal de saída é baseado na amplitude de transmissão da onda no canal de saída. Portanto, assumimos como bit 1 coeficiente de transmissão acima de um valor escolhido t_0 e bit 0 para valores abaixo. Particularmente para este trabalho consideramos como valor de referência o coeficiente de transmissão $t_0 = 0.25$, mas os resultados obtidos relativos à possibilidade de operação lógica permanecem qualitativamente os mesmos para outros valores escolhidos como referência. A tabela 5.1 resume o esquema de digitalização usado neste trabalho para os sinais de entrada e saída. Uma vez já apresentado todo o formalismo e considerações sobre o modelo, vamos às discussões dos resultados obtidos.

5.2 Resultados e Discussões

Para iniciar nossa discussão, nós calculamos o espectro de transmissão $t(k)$ para uma onda incidente com intensidade $|R_0|^2 = 2,0$ para o caso linear ($\alpha = 0$) e não linear ($\alpha = 0,5$) para dois valores distintos da energia on-site no sítio de acoplamento das cadeias, como mostrado na figura 5.2. Nessa figura, a linha sólida preta representa a transmissão para o caso de incidência

Figura 5.3: Formação das portas lógicas possíveis para este modelo. (a) Região com transmissão $t \geq 0,25$ (valor lógico 1) para onda incidindo por um canal, (valor lógico (0,1) ou (1,0)). (b) Região com transmissão $t \geq 0,25$ (valor lógico 1) para onda incidindo pelos dois canais, (valor lógico (1,1)). (c) Superposição das regiões (a) e (b), sendo possível identificar três operações lógicas distintas, AND (azul claro), OR (cinza) e XOR (azul escuro).



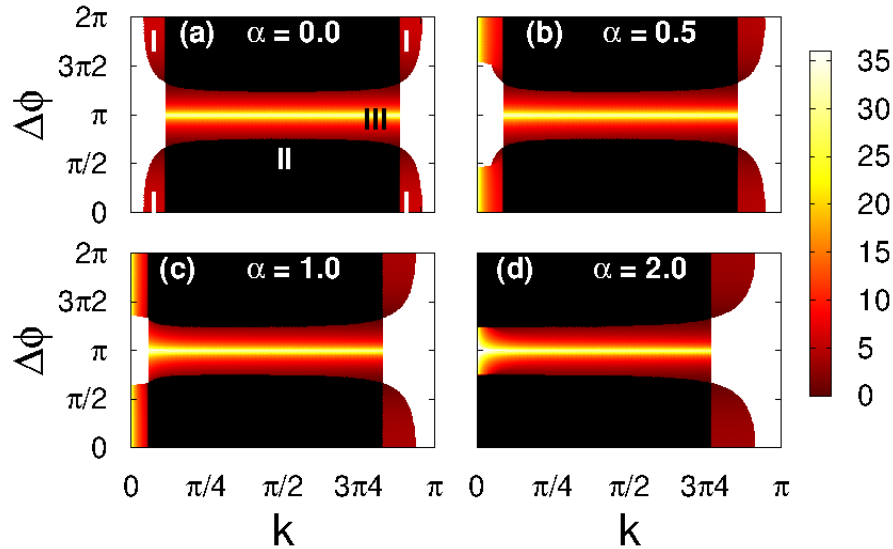
Fonte: Autora, 2015

de onda em um único canal, caracterizando sinal digital (1,0) ou (0,1) e as linhas pontilhadas coloridas indicam entrada de ondas pelos dois canais, com uma diferença de fase entre elas dada por $\Delta\phi$, neste caso, representado pelo valor lógico (1,1). Para todos os casos, observamos que a transmissão máxima ocorreu em valores intermediários de k , sendo que em $k = 0$ e $k = \pi$ a transmissão é nula, como esperado. O coeficiente de transmissão diminui com o aumento da diferença de fase entre as ondas incidentes. Para pequenos valores da energia on-site, a presença de não linearidade induz à emergência de comportamento biestável. Isso permite que exista modos de alta transmissão para vetores de onda pequenos e em regime de pequena diferença de fase e forte não linearidade (usualmente, quando a não linearidade é grande quando comparada com a energia on-site), como pode ser visto na figura 5.2(b). Note que para o caso de valor grande da energia on-site, uma fraca não linearidade não é capaz de gerar biestabilidade (veja figura 5.2(d)). A transmissão de referência $t_0 = 0,25$ é indicada na figura pela linha preta tracejada, e dependendo dos parâmetros do sistema, tem-se transmissão maior ou menor (bit 1 ou 0, respectivamente) do que esse valor para incidência por um ((0,1) ou (1,0)) ou pelos dois

Tabela 5.1: Esquema de digitalização para sinal de entrada e saída. Para entrada, bit 1 (0) corresponde a presença (ausência) de uma onda entrando. Para saída, bit 1 (0) corresponde ao coeficiente de transmissão acima (abaixo) do valor de referência t_0 .

INPUT		OUTPUT	
BIT	SITUATION	BIT	SITUATION
1	$R_0 \neq 0$	1	$t(k, T ^2) \geq 0.25$
0	$R_0 = 0$	0	$t(k, T ^2) < 0.25$

Figura 5.4: Contraste como função do vetor de onda k e da diferença de fase $\Delta\phi$ para alguns valores de não linearidade e V_0 . A região I corresponde à porta do tipo AND, região II, porta OR e região III, porta lógica XOR. (b)-(c) Regime de fraca não linearidade favorece a emergência de porta AND em k pequeno, bem como o aumento do contraste. Portas lógicas em k grande são menos sensíveis à presença de não linearidade. (d) Para regime de forte não linearidade, portas OR e XOR são encontradas em k pequenos.



Fonte: Autora, 2015

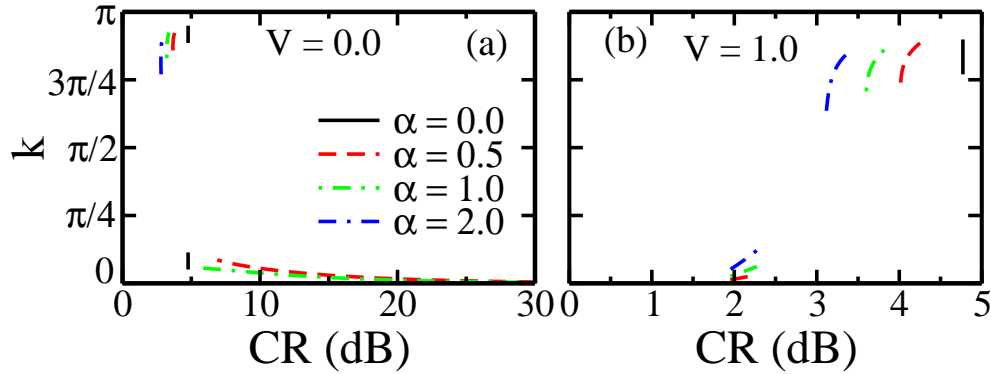
canais (1,1) entrada. Desta maneira é possível identificar algumas operações lógicas.

Seguindo o esquema de digitalização resumido na tabela 5.1, foi possível reconhecer a operação de três portas lógicas neste sistema, são elas: portas AND, XOR e OR. Para visualizar essas operações lógicas observe a figura 5.3. Na figura 5.3(a) é mostrada a região onde a transmissão é maior ou igual à transmissão de corte para uma onda de intensidade $|R_0|^2 = 2,0$ incidindo por um canal, essa situação corresponde a entrada (0,1) ou (1,0) com saída 1. Na figura 5.3(b) temos as regiões de transmissão $t \geq 0,25$ para ondas de mesma intensidade $|R_0|^2 = 2,0$, inci-

Tabela 5.2: Tabela verdade para as operações lógicas AND, XOR e OR. No esquema de digitalização adotado neste trabalho, a entrada (0,0) representa ausência de ondas incidentes e portanto, a saída sefa sempre bit 0. Além disso, devido a simetria do sistema, entradas (0,1) e (1,0) têm saídas idênticas.

LOGIC INPUT		LOGIC OUTPUT		
A	B	AND	OR	XOR
0	0	0	0	0
0	1	0	1	1
1	0	0	1	1
1	1	1	1	0

Figura 5.5: Relação entre o vetor de onda e o contraste para porta AND em $\Delta\phi = \pi/3$ para diferentes valores de não linearidade. (a) Para $V_0 = 0$, valores intermediários da não linearidade favorece o aumento do contraste para pequeno k , devido à biestabilidade. Para valor grande de k o contraste decresce com o aumento da não-linearidade. (b) Para $V_0 = 1$, maior contraste é obtido para vetores de onda grandes, embora este comportamento diminua para fortes não linearidades.



Fonte: Autora, 2015

dindo pelos dois canais com uma diferença de fase entre elas, portanto a representação lógica correspondente é entrada (1,1) e saída 1. Sobrepondo estas duas figuras 5.3(c), é possível identificar três regiões de operações lógicas distintas. As regiões preenchidas de azul claro, onde só há transmissão $t \geq 0,25$ se houver onda entrando pelos dois canais, isso corresponde a porta do tipo AND. As regiões cinzas, onde $t \geq 0,25$ para onda entrando por um ou pelos dois canais, caracterizando portas do tipo OR. E por fim, a região preenchida com azul escuro, na qual só há transmissão maior ou igual ao parâmetro de corte se a onda for inserida por um único canal, a qual representa porta do tipo XOR. Estas operações estão resumidas na tabela 5.2.

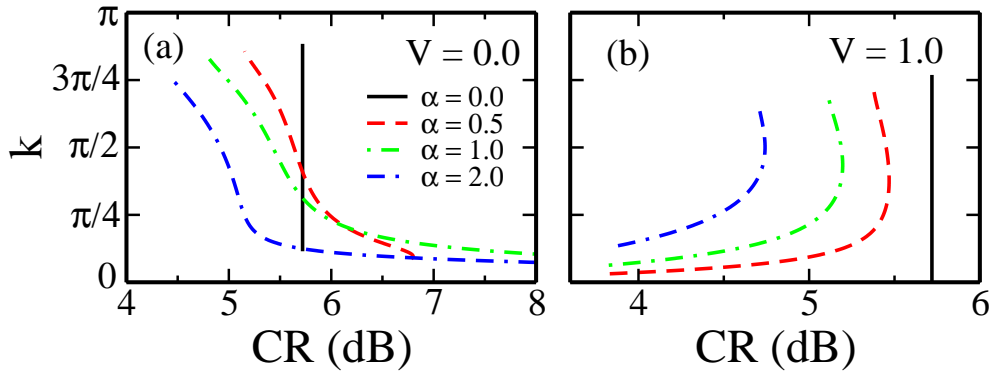
O comportamento das portas lógicas para diferentes valores da não linearidade pode ser visto na figura 5.4. Aqui escolhemos energia on-site $V_0 = 0$ para estudarmos apenas a influência da não linearidade no comportamento das portas. A região I corresponde a operação de porta AND, na região II ocorre porta do tipo OR e na região III, encontramos porta lógica XOR. A região branca não está associada a nenhuma operação lógica e possui transmissão abaixo do valor de referência para todas as combinações de entrada.

A escala de cor mostrada na figura 5.4 indica o contraste (CR) das portas. Esta grandeza é uma importante medida para caracterizar a eficiência da operação lógica. Contraste grande indica que o coeficiente de transmissão medido está distante do valor de referência e portanto, o processo de digitalização é mais resistente a erros e ruídos. O contraste é calculado pela expressão

$$CR = 10 \log_{10} \frac{t_1}{t_0}, \quad (5.7)$$

onde t_1 and t_0 referem aos valores do coeficiente de transmissão para resposta lógica 1 e 0, respectivamente.

Figura 5.6: Relação entre o vetor de onda e o contraste para porta XOR em $\Delta\phi = 5\pi/6$ para diferentes valores de não linearidade. (a) Para $V_0 = 0$, alto contraste ocorre em k pequeno e aumenta com a não linearidade. (b) Para $V_0 = 1$, o contraste depende não-monotonicamente em k , sendo máximo no limite de acoplamento linear.



Fonte: Autora, 2015

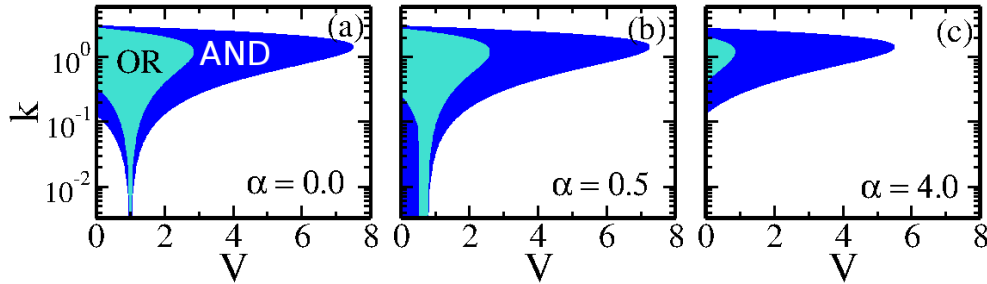
Para o modelo de digitalização adotado neste trabalho não faz sentido falar em contraste para portas do tipo OR, uma vez que todas as configurações de entradas possuem como resposta lógica de saída bit 1, por isso na figura 5.4 as regiões pretas correspondem à porta OR.

Analisando a figura 5.4 é possível notar que os três tipos de portas são obtidos para sistemas lineares, figura 5.4(a). No entanto, a presença de fraca não linearidade favorece o surgimento de porta tipo AND em regiões de vetor de onda pequeno. Isso acontece devido a presença de biestabilidade, figura 5.4(b) e (c). A medida que se aumenta a não linearidade do sistema, a biestabilidade surge também para transmissão através de um único canal e neste caso favorece às portas XOR e OR em pequenos vetores de onda, dependendo da diferença de fase, figura 5.4(d). Note ainda que a influência da não linearidade é pequena sobre as operações lógicas para grandes valores do vetor de onda. Para um valor muito grande da não linearidade, a transmissão através do sítio acoplado é comprometida e nenhuma operação lógica ocorre. É importante destacar que a diferença de fase entre as ondas incidentes pelas duas entradas é responsável pela ocorrência de porta do tipo XOR.

A figura 5.4 nos permite mostrar ainda, a eficiência das portas AND e XOR através da análise do contraste para o caso $V_0 = 0$. A presença de não linearidade favorece o aumento do contraste para a porta AND no regime de pequeno vetor de onda figura 5.4(b) e (c). Esta característica está diretamente relacionada à presença de biestabilidade neste regime. Para vetor de onda grande o contraste diminui quando a não linearidade aumenta. Para a porta XOR, temos fraca dependência do contraste com o vetor de onda, embora o contraste seja um pouco melhor em regime de vetor de onda pequeno.

Para visualizar melhor a eficiência das portas lógicas, analisamos a relação entre o contraste e o vetor de onda para energia on-site $V_0 = 0$ e $V_0 = 1$ em dois valores específicos da diferença de fase. Na figura 5.5 é mostrado o contraste para diferença de fase $\Delta\phi = \pi/3$, correspondente

Figura 5.7: Regiões de operação das portas lógicas AND (azul escuro) e OR (azul claro) como função do vetor de onda e da energia on-site para para distintos valores de acoplamento não linear e nenhuma diferença de fase. (a) Para o caso não linear, portas lógicas em k pequeno apenas surgem próximo à $V_0 = 1$. (b) Fraca não linearidade aumenta a região de porta AND para k pequeno. (c) Forte não linearidade suprime a habilidade para performance de operações lógicas.



Fonte: Autora, 2015.

à porta lógica tipo AND, em regime de vetor de onda grande e pequeno. Note que o valor do contraste é diferente para vetor de onda grande e pequeno, sendo que em k pequeno temos melhor eficiência para $V_0 = 0$. Esta tendência é revertida para $V_0 = 1$, embora neste caso ambas as bandas exibam contraste similar. Note também que em ambos os casos, a banda é mais larga em k pequeno quando o acoplamento não linear é considerado.

Na figura 5.6 mostramos uma análise similar para $\Delta\phi = 5\pi/6$, correspondente à porta lógica XOR. Em $V_0 = 0$, o contraste decresce continuamente como função do vetor de onda k . É interessante enfatizar que em vetor de onda grande, o contraste para dispositivos acoplados não linearmente é menor do que o caso linear correspondente, cujo contraste é mostrado pela linha sólida vertical. Similarmente ao que foi observado para a porta AND, o contraste em vetores de onda pequenos aumenta na presença de acoplamento não linear. Para $V_0 = 1$ o contraste é sempre menor do regime não linear e possui uma dependência não-monotônica com k .

Para entender melhor a influência dos parâmetros relacionados à energia on-site, não linearidade e vetor de onda nas operações lógicas, nós mostramos na figura 5.7 a relação entre as portas OR e AND no espaço da energia on-site e do vetor de onda (V_0, k) para diferentes valores do coeficiente não linear e na ausência de diferença de fase. Na ausência de não linearidade não há significativa operação lógica para k pequeno, exceto na vizinhança de $V_0 = 1$, que corresponde uma região de solução ressonante com $t(0) = 4/9$. Observe que para pequenos valores de V_0 e de k , uma pequena não linearidade influencia fortemente o espectro de transmissão e favorece o surgimento de portas AND. Note ainda que a não linearidade exerce fraca influência no regime de k grande. Adicionalmente, uma forte não linearidade suprime a transmissão e portanto reduz a habilidade do sistema de realizar funções lógicas.

Em resumo, nós demonstramos que um modelo de dispositivo constituído de três canais idênticos lineares, acoplados por um sítio não linear permite operações lógicas distintas a partir

do controle da não linearidade e da diferença de fase entre ondas incidentes. Nós demonstramos que, enquanto uma fraca não linearidade favorece a realização de porta AND para vetores de onda pequeno, as portas OR e XOR são predominantes para fortes não linearidades, com a última ocorrendo para grande diferença de fase. Nós obtivemos a eficiência das portas AND e XOR a partir do cálculo do contraste entre transmissão de bit 0 e 1. Encontramos que alto contraste é obtido no regime de vetor de onda pequeno.

É importante destacar que a estrutura geométrica adotada no trabalho tem sido muito explorada em estudos com nanotubos de carbono e estruturas de DNA. O resultado apresentado aqui mostra que este tipo de estrutura tem potencial para algumas operações lógicas e pode ser interessante estender a análise para características particulares em nanotubos de carbono e segmentos de DNA.

|

6

CONCLUSÕES E PERSPECTIVA

Incentivados pelo largo interesse que há atualmente no desenvolvimento de formas alternativas aos dispositivos eletrônicos, baseados em sistemas ópticos, térmicos e acústicos, com destaque para avanços em computação molecular, diversos estudos tem se dedicado a investigar sistemas que apresentem capacidade de atuar com diodos e portas lógicas, elementos básicos na construção de qualquer circuito digital atual.

Desta maneira, este trabalho vem contribuir com mais conhecimento acerca das propriedades de retificação da transmissão de um sistema não linear assimétrico a partir do estudo da influência da saturação da não linearidade sobre estas propriedades, bem como a possibilidade de explorar estruturas quase-unidimensionais na forma de Y para a realização de portas lógicas usando a diferença de fase entre as ondas incidentes e a não linearidade para controlar a obtenção de diferentes tipos de portas.

Ambos os modelos foram descritos por equações de Schrödinger discretas não lineares e usando um método recursivo baseado na construção de um mapa associado a esta equação foi possível obter os respectivos espectros de transmissão.

Para o estudo sobre a influência da saturação da resposta não linear na transmissão não recíproca foi considerado um dímero não linear acoplado por ambos os lados a cadeias lineares semi-infinitas. Os cálculos do coeficiente de transmissão e do fator de retificação mostraram que a ação de retificação é mais pronunciada em regiões onde ocorre biestabilidade e que a presença de saturação reduz essas regiões, a medida que torna o sistema mais linear. No entanto foi observado que valores intermediários da saturação favorece a transmissão não recíproca, sendo possível obter esse tipo de fenômeno em um espaço maior de intensidade de ondas incidente e com maior valor do coeficiente de transmissão. Além disso, através do estudo do fator de retificação, foi mostrado que a influência da saturação ocorre de maneira distinta para grande e pequeno comprimentos de onda, indicando que fator de retificação negativo é mais eficiente para utilização em uma possível aplicação como dispositivo. Foi mostrado ainda que presença

de assimetria no perfil da não linearidade também pode conduzir a um comportamento tipo diodo.

Para a investigação da ação de funções lógicas, foi considerado um sistema constituído por três cadeias lineares unidas por um sítio não linear, onde duas funcionam como cadeias de entrada e uma como cadeia de saída. O coeficiente de transmissão foi encontrado para o caso de uma onda sendo inserida por uns dos canais, o que corresponde a valor lógico (1,0) ou (0,1), e para o caso de ondas inseridas nos dois canais e neste situação apresentam uma diferença de fase entre elas, aqui o valor lógico é (1,1). O valor lógico para o canal de saída foi baseado na modulação da amplitude. Baseado neste sistema, foram identificadas três tipos de portas lógicas, são elas AND, OR e XOR. Foi observado que a presença de portas do tipo AND para pequeno vetor de onda é favorecida por uma fraca não linearidade, enquanto que forte não linearidade favorece a obtenção de portas OR e XOR. O cálculo da eficiência das portas mostrou que maior contraste é encontrado em pequeno vetor de onda. Quando a não linearidade é a contribuição principal do sistema comparado com o potencial, as portas AND e XOR possuem alto contraste para o regime de vetor de onda pequeno. Os resultados discutidos aqui mostram que estruturas na forma de Y possuem potencial para serem utilizadas em operações lógicas.

Como perspectiva de trabalho, temos o interesse em investigar o transporte não recíproco nessas estruturas tipo Y. Neste sentido, seria interessante desenvolver modelos de sistemas que possam realizar operações lógicas de maneira não recíproca. Devido ao grande interesse no cenário da área biomolecular, pretendemos estender a análise desenvolvida aqui para incluir características particulares que aproximem o modelo do comportamento de estruturas de DNA, tais como sua estrutura de dupla hélice, sua composição específica de quatro nucleotídeos, a distinção dos parâmetros de hopping entre- e inter-cadeias, entre outros. Esperamos que a continuidade deste trabalho possa contribuir para o crescente campo de aplicações de métodos oriundos da física do estado sólido para o estudo de sistemas nanobiomoleculares.

REFERÊNCIAS

- 1 MOLINA, M. Nonlinearity in materials science. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 15, n. 18, p. 2409, 2001.
- 2 LAM, L. *Introduction to nonlinear physics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2003.
- 3 GALLÉAS, W. et al. Ondas do tipo sóliton em guias dielétricos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 25, n. 3, p. 294, 2003.
- 4 JUNGES, L. *Equação de Schroedinger não linear discreta com desordem de Aubry-André e com campo elétrico DC*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.
- 5 HENNIG, D. et al. Charge transport in poly (dg)–poly (dc) and poly (da)–poly (dt) dna polymers. *Journal of biological physics*, Springer, v. 30, n. 3, p. 227, 2004.
- 6 DUNLAP, D.; KENKRE, V.; REINEKER, P. Self-trapping transition for a nonlinear impurity embedded in a lattice. *Physical Review B*, APS, v. 47, n. 22, p. 14842, 1993.
- 7 AGRAWAL, G. P. *Nonlinear fiber optics*. [S.l.]: Academic press, 2007.
- 8 KARTASHOV, Y. V.; MALOMED, B. A.; TORNER, L. Solitons in nonlinear lattices. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 83, n. 1, p. 247, 2011.
- 9 MOURA, F. de et al. Wave-packet dynamics in chains with delayed electronic nonlinear response. *Physical review letters*, APS, v. 103, n. 9, p. 096401, 2009.
- 10 MISHCHENKO, A.; NAGAOSA, N. Electron-phonon coupling and a polaron in the t-j model: From the weak to the strong coupling regime. *Physical review letters*, APS, v. 93, n. 3, p. 036402, 2004.
- 11 CAMPBELL, D. K.; FLACH, S.; KIVSHAR, Y. S. Localizing energy through nonlinearity and discreteness. *Physics Today*, American Institute of Physics, v. 57, n. 1, p. 43, 2004.
- 12 ANDRIOTIS, A. N. et al. Rectification properties of carbon nanotube “y-junctions”. *Physical review letters*, APS, v. 87, n. 6, p. 066802, 2001.

- 13 NAGY, P. et al. Y-branching of single walled carbon nanotubes. *Applied Physics A*, Springer, v. 70, n. 4, p. 481, 2000.
- 14 BANDARU, P. R. et al. Novel electrical switching behaviour and logic in carbon nanotube y-junctions. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 4, n. 9, p. 663, 2005.
- 15 OLIVEIRA, J. et al. Electronic transport through oligopeptide chains: An artificial prototype of a molecular diode. *Chemical Physics Letters*, Elsevier, v. 612, p. 14, 2014.
- 16 GAETA, G. et al. Simple models of non-linear DNA dynamics. *La Rivista del Nuovo Cimento (1978-1999)*, Springer, v. 17, n. 4, p. 1, 1994.
- 17 CARR, P. A.; CHURCH, G. M. Genome engineering. *Nature biotechnology*, Nature Publishing Group, v. 27, n. 12, p. 1151, 2009.
- 18 CHANG, C. et al. Solid-state thermal rectifier. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 314, n. 5802, p. 1121, 2006.
- 19 LI, N. et al. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 84, n. 3, p. 1045, 2012.
- 20 WANG, Y. et al. Phonon lateral confinement enables thermal rectification in asymmetric single-material nanostructures. *Nano letters*, ACS Publications, v. 14, n. 2, p. 592, 2014.
- 21 KONOTOP, V. V.; KUZMIAK, V. Nonreciprocal frequency doubler of electromagnetic waves based on a photonic crystal. *Physical Review B*, APS, v. 66, n. 23, p. 235208, 2002.
- 22 ROY, D. Few-photon optical diode. *Physical Review B*, APS, v. 81, n. 15, p. 155117, 2010.
- 23 LONGHI, S. Non-reciprocal transmission in photonic lattices based on unidirectional coherent perfect absorption. *Optics letters*, Optical Society of America, v. 40, n. 7, p. 1278, 2015.
- 24 LIANG, B. et al. An acoustic rectifier. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 12, p. 989, 2010.
- 25 BOECHLER, N.; THEOCHARIS, G.; DARAIIO, C. Bifurcation-based acoustic switching and rectification. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 10, n. 9, p. 665, 2011.
- 26 YUAN, B. et al. Broadband directional acoustic waveguide with high efficiency. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 101, n. 4, p. 043503, 2012.
- 27 MAZNEV, A.; EVERY, A.; WRIGHT, O. Reciprocity in reflection and transmission: What is a 'phonon diode'? *Wave Motion*, Elsevier, v. 50, n. 4, p. 776, 2013.

- 28 LI, N.; REN, J. Non-reciprocal geometric wave diode by engineering asymmetric shapes of nonlinear materials. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 4, 2014.
- 29 POTTON, R. Reciprocity in optics. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 67, n. 5, p. 717, 2004.
- 30 LIRA, H. et al. Electrically driven nonreciprocity induced by interband photonic transition on a silicon chip. *Physical review letters*, APS, v. 109, n. 3, p. 033901, 2012.
- 31 LI, Y. et al. Wave-packet rectification in nonlinear electronic systems: A tunable aharonov-bohm diode. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 4, 2014.
- 32 LEPRI, S.; CASATI, G. Asymmetric wave propagation in nonlinear systems. *Physical review letters*, APS, v. 106, n. 16, p. 164101, 2011.
- 33 KVASHNIN, D.; CHERNOZATONSKII, L. Impact of symmetry in transport properties of graphene nanoribbons with defects. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 105, n. 8, p. 083115, 2014.
- 34 HAYES, J. P. *Introduction to digital logic design*. [S.l.]: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1993.
- 35 FRAGA, W. et al. All optical logic gates based on an asymmetric nonlinear directional coupler. *Optics communications*, Elsevier, v. 262, n. 1, p. 32, 2006.
- 36 ISHIZAKA, Y. et al. Design of optical xor, xnor, nand, and or logic gates based on multi-mode interference waveguides for binary-phase-shift-keyed signal. *Lightwave Technology, Journal of, IEEE*, v. 29, n. 18, p. 2836, 2011.
- 37 COELHO, A. et al. Switching and enhanced bistability in an asymmetric nonlinear directional coupler with a metamaterial channel. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Elsevier, v. 18, n. 5, p. 1258, 2013.
- 38 GOGOI, N.; SAHU, P. P. All-optical compact surface plasmonic two-mode interference device for optical logic gate operation. *Applied optics*, Optical Society of America, v. 54, n. 5, p. 1051, 2015.
- 39 LIU, W. et al. Design of ultra compact all-optical xor, xnor, nand and or gates using photonic crystal multi-mode interference waveguides. *Optics & Laser Technology*, Elsevier, v. 50, p. 55, 2013.
- 40 RANI, P.; KALRA, Y.; SINHA, R. K. Realization of and gate in y shaped photonic crystal waveguide. *Optics Communications*, Elsevier, v. 298, p. 227, 2013.

- 41 YOUNIS, R. M.; AREED, N. F. F.; OBAYYA, S. S. A. Fully integrated and and or optical logic gates. *IEEE Photonics Technology Letters*, IEEE, v. 26, n. 19, p. 1900, 2014.
- 42 LEE, K.-Y. et al. The designs of xor logic gates based on photonic crystals. In: INTERNATIONAL SOCIETY FOR OPTICS AND PHOTONICS. *Asia Pacific Optical Communications*. [S.l.], 2008. p. 71353Y.
- 43 LIU, Q. et al. Dna computing on surfaces. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 403, n. 6766, p. 175, 2000.
- 44 MIYAMOTO, T. et al. Synthesizing biomolecule-based boolean logic gates. *ACS synthetic biology*, ACS Publications, v. 2, n. 2, p. 72, 2012.
- 45 WU, C. et al. A survey of advancements in nucleic acid-based logic gates and computing for applications in biotechnology and biomedicine. *Chemical Communications*, Royal Society of Chemistry, v. 51, n. 18, p. 3723, 2015.
- 46 ZADEGAN, R. M. et al. Construction of a fuzzy and boolean logic gates based on dna. *Small*, Wiley Online Library, v. 11, n. 15, p. 1811, 2015.
- 47 ZHU, J. et al. Aptamer-based sensing platform using three-way dna junction-driven strand displacement and its application in dna logic circuit. *Analytical chemistry*, ACS Publications, v. 86, n. 1, p. 312, 2013.
- 48 YOUNG, R. M. et al. Charge transport across dna-based three-way junctions. *Journal of the American Chemical Society*, ACS Publications, v. 137, n. 15, p. 5113, 2015.
- 49 CHEN, J.; ZHOU, S.; WEN, J. Concatenated logic circuits based on a three-way dna junction: A keypad-lock security system with visible readout and an automatic reset function. *Angewandte Chemie*, Wiley Online Library, v. 127, n. 2, p. 456, 2015.
- 50 BUCKHOUT-WHITE, S. et al. A triangular three-dye dna switch capable of reconfigurable molecular logic. *RSC Advances*, Royal Society of Chemistry, v. 4, n. 90, p. 48860, 2014.
- 51 DERYCKE, V. et al. Carbon nanotube inter-and intramolecular logic gates. *Nano Letters*, ACS Publications, v. 1, n. 9, p. 453, 2001.
- 52 SILVA, G. D. et al. Modulational instability in lossless fibers with saturable delayed nonlinear response. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 26, n. 1, p. 183, 2009.
- 53 GUZMÁN-SILVA, D. et al. Multistable regime and intermediate solutions in a nonlinear saturable coupler. *Physical Review A*, APS, v. 87, n. 4, p. 043837, 2013.
- 54 CAO, P. et al. Gap solitons supported by parity-time-symmetric optical lattices with defocusing saturable nonlinearity. *Optics Communications*, Elsevier, v. 316, p. 190, 2014.

- 55 SHI, W. et al. Intrinsic localized modes in a nonlinear electrical lattice with saturable nonlinearity. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 103, n. 3, p. 30006, 2013.
- 56 SKLAN, S. R. Splash, pop, sizzle: Information processing with phononic computing. *AIP Advances*, AIP Publishing, v. 5, n. 5, p. 053302, 2015.
- 57 DIODO semiconductor. In: WIKIPÉDIA: a enciclopédia livre. Wikimedia, 2015. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Diodo_semicondutor>. Acesso em: 28 ago. 2015.
- 58 LEVY, M. Nanomagnetic route to bias-magnet-free, on-chip faraday rotators. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 22, n. 1, p. 254, 2005.
- 59 KUMAR, P.; LEVY, M. On-chip optical isolation via unidirectional bloch oscillations in a waveguide array. *Optics letters*, Optical Society of America, v. 37, n. 18, p. 3762, 2012.
- 60 EL-GANAINY, R. et al. On-chip non-reciprocal optical devices based on quantum inspired photonic lattices. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 103, n. 16, p. 161105, 2013.
- 61 SCALORA, M. et al. The photonic nnd edge optical diode. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 76, n. 4, p. 2023, 1994.
- 62 TOCCI, M. D. et al. Thin-film nonlinear optical diode. *Applied physics letters*, AIP Publishing, v. 66, n. 18, p. 2324, 1995.
- 63 ZHUKOVSKY, S. V.; SMIRNOV, A. G. All-optical diode action in asymmetric nonlinear photonic multilayers with perfect transmission resonances. *Physical Review A*, APS, v. 83, n. 2, p. 023818, 2011.
- 64 NASCIMENTO, E. M. *Aspectos da transmissão eletromagnética em filmes de multicamadas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal Alagoas, Maceió, 2009.
- 65 JAMSHIDI-GHALEH, K.; SAFARI, Z.; MOSLEMI, F. Angular and polarization dependence of all optical diode in one-dimensional photonic crystal. *The European Physical Journal D*, Springer, v. 69, n. 4, p. 1, 2015.
- 66 MINGALEEV, S. F.; KIVSHAR, Y. S. Nonlinear transmission and light localization in photonic-crystal waveguides. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 19, n. 9, p. 2241, 2002.
- 67 XU-SHENG, L.; SHENG, L. Unidirectional transmission in asymmetrically confined photonic crystal defects with kerr nonlinearity. *Chinese Physics Letters*, IOP Publishing, v. 22, n. 11, p. 2847, 2005.
- 68 ZHAO, N.-S. et al. Design of highly efficient optical diodes based on the dynamics of nonlinear photonic crystal molecules. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 23, n. 11, p. 2434, 2006.

- 69 WANG, L.; LI, B. Phononics gets hot. *Phys. World*, v. 21, p. 27, 2008.
- 70 TERRANELO, M.; PEYRARD, M.; CASATI, G. Controlling the energy flow in nonlinear lattices: a model for a thermal rectifier. *Physical Review Letters*, APS, v. 88, n. 9, p. 094302, 2002.
- 71 LI, B.; WANG, L.; CASATI, G. Thermal diode: Rectification of heat flux. *Physical review letters*, APS, v. 93, n. 18, p. 184301, 2004.
- 72 LI, B.; LAN, J.; WANG, L. Interface thermal resistance between dissimilar anharmonic lattices. *Physical review letters*, APS, v. 95, n. 10, p. 104302, 2005.
- 73 YANG, N. et al. Thermal rectification and negative differential thermal resistance in lattices with mass gradient. *Physical Review B*, APS, v. 76, n. 2, p. 020301, 2007.
- 74 MALDOVAN, M. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 503, n. 7475, p. 209, 2013.
- 75 LIANG, B.; YUAN, B.; CHENG, J.-c. Acoustic diode: Rectification of acoustic energy flux in one-dimensional systems. *Physical review letters*, APS, v. 103, n. 10, p. 104301, 2009.
- 76 POPA, B.-I.; CUMMER, S. A. Non-reciprocal and highly nonlinear active acoustic metamaterials. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 5, 2014.
- 77 MARINHO, L. Como computadores representam informação. Disponível em: <<https://lucianomanutencao.blogspot.com.br/2012/10/como-computadores-representam-informacao.html>>. Acesso em: 09 out. 2015.
- 78 GONÇALVES, B. Projetos de circuitos lógicos (notas de aula). Disponível em: <<http://www.inf.ufes.br/zegonc/material/Introducao-a-Computacao/Proj-Circuitos-Logicos>>. Acesso em: 08 out. 2015.
- 79 RANI, P.; KALRA, Y.; SINHA, R. Design of all optical logic gates in photonic crystal waveguides. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, Elsevier, v. 126, n. 9, p. 950, 2015.
- 80 SOTO, H. et al. All-optical and gate implementation using cross-polarization modulation in a semiconductor optical amplifier. *Photonics Technology Letters, IEEE*, IEEE, v. 14, n. 4, p. 498, 2002.
- 81 MCCUTCHEON, M. W. et al. All-optical conditional logic with a nonlinear photonic crystal nanocavity. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 95, n. 22, p. 221102, 2009.
- 82 FUJISAWA, T.; KOSHIBA, M. All-optical logic gates based on nonlinear slot-waveguide couplers. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 23, n. 4, p. 684, 2006.

- 83 LIU, Y. et al. All-optical logic gates based on two-dimensional low-refractive-index nonlinear photonic crystal slabs. *Optics express*, Optical Society of America, v. 19, n. 3, p. 1945, 2011.
- 84 LI, Q.; YUAN, H. All-optical logic gates based on cross-phase modulation in an asymmetric coupler. *Optics Communications*, v. 319, p. 90–94, 2014. ISSN 0030-4018. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030401814000169>>.
- 85 LI, Q. et al. All-optical logic gates based on wavelength conversion in a nonlinear directional coupler. *Optics Communications*, Elsevier, v. 354, p. 246, 2015.
- 86 ANDALIB, P.; GRANPAYEH, N. All-optical ultracompact photonic crystal and gate based on nonlinear ring resonators. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 26, n. 1, p. 10–16, 2009.
- 87 WANG, H.; YU, X.; RONG, X. All-optical and, xor, and not logic gates based on y-branch photonic crystal waveguide. *Optical Engineering*, International Society for Optics and Photonics, v. 54, n. 7, p. 077101, 2015.
- 88 FU, Y.; HU, X.; GONG, Q. Silicon photonic crystal all-optical logic gates. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 377, n. 3, p. 329, 2013.
- 89 MA, D.-L. et al. Simple dna-based logic gates responding to biomolecules and metal ions. *Chemical Science*, Royal Society of Chemistry, v. 4, n. 9, p. 3366, 2013.
- 90 DING, E.-X. et al. Y-junction carbon nanocoils: synthesis by chemical vapor deposition and formation mechanism. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 5, 2015.
- 91 CHATTERJEE, S. et al. Probing y-shaped dna structure with time-resolved fret. *Nanoscale*, Royal Society of Chemistry, v. 4, n. 5, p. 1568, 2012.
- 92 FENG, X. et al. Fluorescence logic-signal-based multiplex detection of nucleases with the assembly of a cationic conjugated polymer and branched dna. *Angewandte Chemie*, Wiley Online Library, v. 121, n. 29, p. 5420, 2009.
- 93 ALBUQUERQUE, E. L. et al. DNA-based nanobiostructured devices: The role of quasiperiodicity and correlation effects. *Physics Reports*, Elsevier, v. 535, n. 4, p. 139, 2014.
- 94 AMOREIRA, J.; JESUS, M. de. Física do estado sólido (notas de aula). 2002. Disponível em: <<http://www.dfisica.ubi.pt/~amoreira/lectnotes/fesnts.pdf>>. Acesso em: 29 out. 2015.
- 95 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. [S.l.]: Harcourt College, 1976.
- 96 OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. de. *Introdução à física do estado sólido*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.

-
- 97 SÁNCHEZ, A.; MACIÁ, E.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Suppression of localization in kronig-penney models with correlated disorder. *Physical Review B*, APS, v. 49, n. 1, p. 147, 1994.
- 98 HENNIG, D.; TSIRONIS, G. P. Wave transmission in nonlinear lattices. *Physics Reports*, Elsevier, v. 307, n. 5, p. 333, 1999.
- 99 KOTTOS, T.; TSIRONIS, G.; IZRAILEV, F. M. Transport properties of one-dimensional kronig-penney models with correlated disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 9, n. 8, p. 1777, 1997.
- 100 ASSUNÇÃO, T.; NASCIMENTO, E.; LYRA, M. Nonreciprocal transmission through a saturable nonlinear asymmetric dimer. *Physical Review E*, APS, v. 90, n. 2, p. 022901, 2014.

Apêndice A

ARTIGOS PUBLICADOS

Nonreciprocal transmission through a saturable nonlinear asymmetric dimer

T. F. Assunção, E. M. Nascimento, and M. L. Lyra

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

(Received 30 March 2014; revised manuscript received 11 June 2014; published 4 August 2014)

We investigate the nonreciprocal diodelike behavior of a dimer with an asymmetric on-site potential and a saturable nonlinearity. The dimer is coupled to linear side chains. The spectra of transmission and the rectifying factor are analytically obtained using a backward iteration of the set of discrete nonlinear Schrödinger equations used to model the wave propagation through the nonlinear dimer. We show that the windows of bistable behavior leading to a pronounced nonreciprocal diodelike transmission become wider and displaced to higher input field intensities as the saturation coefficient increases. Further, saturation of the nonlinear response has opposite impacts on the rectifying action over short- and long-wavelength input signals within the second bistability window. In the first window, the rectifying action is not compromised by the saturation, thus showing that a weak contribution of high-order susceptibilities to the nonlinear response can improve the efficiency of the nonreciprocal transmission. The rectifying action of a dimer with an asymmetric nonlinearity is also discussed.

DOI: 10.1103/PhysRevE.90.022901

PACS number(s): 05.45.-a, 42.65.Pc, 42.25.Bs

I. INTRODUCTION

Wave transport through nonlinear media has been extensively studied in several branches of physics [1]. In solid state physics, for example, nonlinear contributions to the electronic transport arise from an underlying coupling with lattice vibrations. While the electron-phonon coupling may lead to the formation of Cooper pairs and promote the emergence of a superconducting low-temperature phase, a strong coupling with optical phonons favors the localization of electronic wave packets, a phenomenon usually termed self-trapping [2–4]. Nonlinearity is also relevant to the dynamics of Bose-Einstein condensates and has its origin in interparticle interactions [5]. In optical waveguides, nonlinearity emerges whenever intense fields modify the characteristic response functions, particularly the refraction index [6]. The interplay of dispersive and nonlinear contributions is responsible for many physical phenomena, such as soliton formation [7,8], breather solution modes [9], and modulational instability [10], that have been explored in the context of several devices [6].

Devices that are able to control energy and mass flow are key technological components. One of the main devices within this context is the so-called diode which can directionally control transport. Besides the usual control of electronic current, there are several recent works demonstrating a similar rectification of heat flow [11–13] and acoustic [14–16] and electromagnetic [17–20] waves. The diode effect is usually based on the nonreciprocal transmission of input signals through a one-dimensional channel and it can be obtained by exploring distinct physical mechanisms. In particular, it has been demonstrated that the diode effect can be obtained when transmitting waves through nonlinear asymmetric multilayered systems [21–23]. By modeling the wave motion through a multilayered system by a set of discrete Schrödinger equations with a third-order nonlinear contribution (a Kerr-like nonlinearity), it has been recently shown that a pronounced rectifying factor, meaning a pronounced difference between left-to-right and right-to-left transmission, can be obtained in systems with just two nonlinear asymmetric layers [22]. A complex structure of rectifying bands appears as a function of the wave vector and wave intensity when more layers are added. Large rectifying

factors in conjunction with large transmission coefficients have been shown to be achievable in hybrid multilayered systems composed of superposed Fabry-Pérot-resonator and photonic-crystal structures [23]. Asymmetric transport can also take place due to the combination of parity-time symmetry and nonlinearity with a high rectifying response with low signal losses [24].

However, higher-order susceptibilities are excited when intense pulses propagate in matter and usually this leads to the saturation of the nonlinear response. As a consequence, the medium recovers its linear behavior in the regime of high wave amplitudes, but exhibiting a group velocity distinct from that for low-amplitude waves [6]. The saturation of the nonlinear response has been shown to have nontrivial impacts on the wave dynamics. For example, it may lead to the formation of two stable soliton pulses with the same time duration [25]. Saturation of the nonlinear Kerr response has also been shown to modify the modulational instability of continuous waves [26–29] and the propagation of coherent states in optical fibers [30]. The existence and stability of defect solitons in systems with saturable nonlinearity and parity-time symmetry has been recently demonstrated [31,32]. In discrete nonlinear lattices, saturation favors the simultaneous emergence of two stable fundamental modes which gives rise to a new class of solutions [33]. Further, electric circuits have been proposed in which the saturation of nonlinear components induces a transition to a regime in which localized modes can freely move [34]. On the other hand, a recent study has shown that a regime of nonthermalization persists in a chain of nonlinear oscillators even in the presence of saturation [35]. Although the influence of saturation on the dynamics of wave propagation in nonlinear systems has been evaluated in several physical contexts, the question regarding the possible persistence of a nonreciprocal transmission in saturable nonlinear asymmetric systems is still open.

In the present work we address the above question by investigating the nonreciprocal transmission through an asymmetric dimer with a saturable nonlinearity coupled to linear side chains. By modeling the system by a set of discrete Schrödinger equations, we will explore the influence

of saturation of the nonlinear response on the bistability phenomenon and the resulting nonreciprocal diodelike behavior. The full spectra of the transmission coefficient and rectifying factor will be analytically computed based on a backward iterative approach. In particular, we will show that, while the bistability windows become wider and are displaced to higher input intensities when the saturation coefficient increases, the almost perfect rectifying action at the first window is robust against saturation. The saturation effect on the second bistability window will be shown to have opposite trends for short- and long-wavelength input signals. The nonreciprocal transmission through a dimer with an asymmetric nonlinearity will also be analyzed.

II. MODEL AND FORMALISM

We will model a nonlinear dimer coupled to linear side chains by using a set of discrete Schrödinger equations to describe the wave's time evolution. Expanding the wave vector in the basis of localized Wannier states $|\psi_n(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t)|n\rangle$, tight-binding-like equations relating the wave amplitude at neighboring sites can be written as

$$i \frac{d\psi_n(t)}{dt} = V_n \psi_n(t) - \psi_{n+1}(t) - \psi_{n-1}(t) + \frac{\alpha_n |\psi_n(t)|^2}{1 + \beta |\psi_n(t)|^2} \psi_n(t), \quad (1)$$

in which we considered the off-diagonal element unitary without loss of generality. Here, the sites $n = 1$ and 2 represent the nonlinear dimer while those with $n \leq 0$ and $n \geq 3$ represent the semi-infinite linear side chains. The parameter α_n represents the strength of a third-order nonlinear response in the regime of low-amplitude waves, acting only within the nonlinear dimer. β is the parameter that controls the saturation of this nonlinear response. V_n stand for the on-site energy at site n . Here, we will consider two equivalent side chains with $V_n = 0$ on all sites. Within the nonlinear dimer, the on-site energies are asymmetric, meaning $V_1 \neq V_2$, a necessary condition to achieve nonreciprocal transport.

The above set of equations has stationary solutions in the form $\psi_n(t) = \psi_n e^{-i\omega t}$. Outside the nonlinear dimers, these stationary solutions can be decomposed into harmonic waves satisfying the dispersion relation $\omega = -2 \cos k$, where k is the wave vector of a particular harmonic component. The solutions associated with the transmission problem of a harmonic wave of wave vector k coming from the left can be put in the form

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 1, \\ T e^{ikn}, & n \geq 2, \end{cases} \quad (2)$$

where R_0 , R , and T are the incident, reflected, and transmitted amplitudes, respectively (see Fig. 1 for a sketch of the system). In order to relate the incident and transmitted amplitudes, we followed a backward iterative process of the time-independent discrete nonlinear Schrödinger equation [22] to express the wave amplitude at site $n - 1$ as

$$\psi_{n-1} = -\psi_{n+1} + \left(V_n - \omega + \frac{\alpha_n |\psi_n|^2}{1 + \beta |\psi_n|^2} \right) \psi_n. \quad (3)$$

The wave function continuity in the interface of the nonlinear dimer with the right side chain gives $\psi_2 = T e^{2ik}$ and

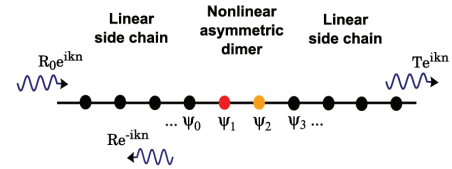


FIG. 1. (Color online) Sketch of the studied system. The central dimer is asymmetric and nonlinear.

$\psi_3 = T e^{3ik}$. After the iteration process, one can express ψ_0 and ψ_1 in terms of the transmitted amplitude T and wave vector k . The boundary condition in the interface with the left side chain provides

$$R_0 = \frac{\psi_0 e^{-ik} - \psi_1}{e^{-ik} - e^{ik}}, \quad (4)$$

and, after some short algebra, the transmission coefficient can be written as

$$t(k, |T|^2) = \frac{|T|^2}{|R_0|^2} = \left| \frac{e^{ik} - e^{-ik}}{1 + (v - e^{ik})(e^{ik} - \delta)} \right|^2, \quad (5)$$

where

$$v = V_1 - \omega + \frac{\alpha_1 |T|^2 (1 - 2\delta \cos k + \delta^2)}{1 + \beta |T|^2 (1 - 2\delta \cos k + \delta^2)}$$

and

$$\delta = V_2 - \omega + \frac{\alpha_2 |T|^2}{1 + \beta |T|^2}.$$

To obtain the transmission coefficient for the case of a harmonic wave coming from the right of the nonlinear dimer, one can just follow the same previous steps but exchanging the subscripts 1 and 2. Hereafter, we will refer to t_L and t_R when describing the transmission of waves coming from the left and from the right, respectively. To characterize the nonreciprocal diodelike transmission, we will calculate the rectifying factor, defined as the relative difference between the left and right transmission coefficients [22],

$$f(k, |T|^2) = \frac{t_L(k, |T|^2) - t_R(k, |T|^2)}{t_L(k, |T|^2) + t_R(k, |T|^2)}. \quad (6)$$

The rectifying factor reaches maximum values of ± 1 for perfect diode action. While strongly asymmetric nonlinear structures can provide spectral regions with large rectifying factor, these usually have a relatively small transmission coefficient. Here, we will focus on weakly asymmetric nonlinear dimers, aiming to achieve conditions with large transmission and rectification. In most of the following analysis, we will consider the particular case of $V_1 = -2.625$, $V_2 = -2.375$, and $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha = 1.0$.

III. RESULTS

A. Bistability and nonreciprocal transmission

Let us start our analysis of the transmission properties through an asymmetric dimer with saturable nonlinearity by plotting the typical relation between the intensities of the

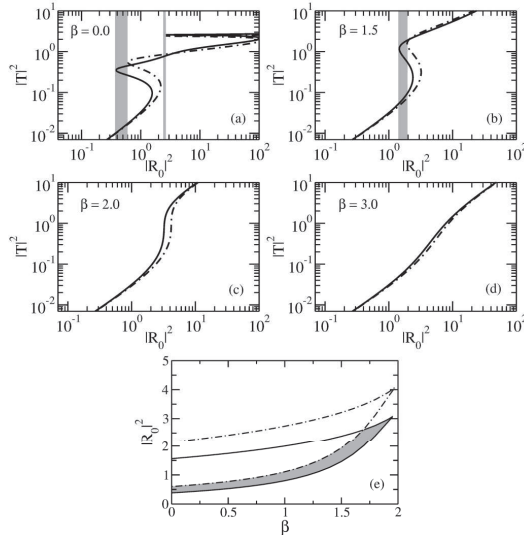


FIG. 2. (a)–(d) Relation between the intensities of transmitted and incident waves for distinct values of the saturation parameter β . The cases of right (solid line) and left (dashed line) incidences are shown for $k = 0.1$ (long wavelength). Nonreciprocal left and right transmissions are more pronounced in regions exhibiting bistability, which is suppressed as the saturation coefficient increases. The dashed areas represent the regimes in which there is bistability for only one of the incidence directions. (e) Curves delimiting the range of the first window of bistability for right (solid line) and left (dashed line) incidences as a function of the saturation coefficient β . The shaded area represents the regime of potential rectifying action.

incoming and transmitted waves for distinct values of the saturation parameter β , as illustrated in Figs. 2(a)–2(d) for a particular small value of the wave vector $k = 0.1$. Both cases of left and right incidence are depicted. In the absence of saturation, $\beta = 0$, one observes two windows of bistability in which distinct intensities can be transmitted for a single incident intensity. These windows are slightly displaced for left and right incidence. The first window of bistable behavior for waves coming from the right starts at an intensity that is smaller than the corresponding one for left incidence. Therefore, there is a small range of incident intensities in which a mode of high transmitted intensity can exist when the wave comes from the right, while only a small transmission is achievable for left incidence. This trend is reversed in the second bistability region. These regions are shaded for better visualization. This is the characteristic signature of the strong rectifying action of the nonlinear asymmetric dimer. When the saturation of the nonlinear response is considered, bistability is suppressed. However, a small asymmetry between the cases of left and right incidence persists even in the absence of bistability, which indicates a decreasing rectifying action as the saturation parameter increases. In Fig. 2(e) we show the range of intensities of an incoming wave with $k = 0.1$ corresponding to the first bistability region for both left and right incidences

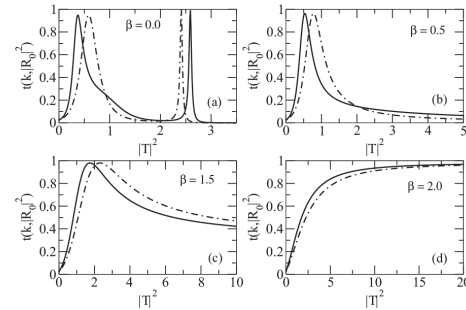


FIG. 3. Transmission coefficient as a function of the transmitted wave intensity for distinct values of the saturation parameter β . The cases of right (solid line) and left (dashed line) incidences are shown for $k = 0.1$ (long wavelength). The peaks with large nonreciprocal transmission are displaced to higher transmitted wave intensities as the saturation parameter increases.

as a function of the saturation coefficient. It clearly shows the suppression of the bistability and its displacement to higher amplitudes as β increases. The dashed area represents the regime with potential rectifying action.

In Fig. 3, we plot the transmission coefficient as a function of the intensity of the transmitted wave for the cases of left and right incidences with wave vector $k = 0.1$ and distinct saturation parameters. Peaks in the transmission coefficient signal the emergence of bistable behavior. Notice that the peaks on the transmission curves corresponding to left and right incidence appear in the reverse order in the first and second windows. These peaks are displaced to large intensities and broaden as the saturation parameter increases. The transmission curves become monotonic for large values of the saturation parameters due to the absence of bistability.

A better scenario of the saturation effect on the nonreciprocal transmission can be obtained by plotting the transmission coefficient as a function of the incident wave intensity $|R_0|^2$, as shown in Fig. 4. In the absence of saturation, there is a pronounced difference in the transmission of left and right incidences for intensities in the range between the first peaks of each transmission curve (shown as shaded areas). There is a mode with very large transmission coefficient for right incidence while only a single mode with small transmission for left incidence. This trend is reversed in the second bistability window, although with a smaller contrast. However, it is important to stress that the transmission coefficient is relatively large in the intensity ranges leading to nonreciprocal transmission. Notice also that the intensity range leading to a pronounced nonreciprocal transmission increases with the saturation parameter β without compromising the transmission coefficient. At high values of β , there is no bistability and the rectifying action is continuously suppressed.

In Fig. 5 we provide a color plot of the transmission coefficient for the case of left incidence as a function of the wave vector k and incident intensity $|R_0|^2$. A similar plot is obtained for right incidence with the transmission bands slightly displaced. In the regions exhibiting bistability, the data correspond to the maximum transmission. For small and large

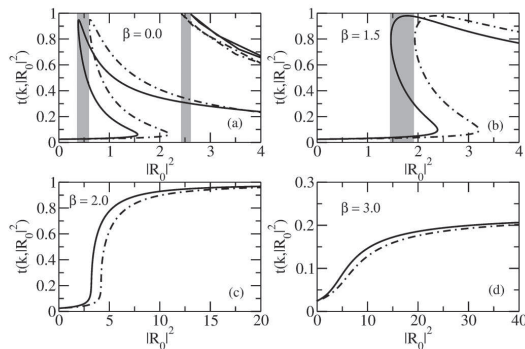


FIG. 4. Transmission coefficient as a function of the incident wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β . The cases of right (solid line) and left (dashed line) incidences are shown for $k = 0.1$ (long wavelength). The shaded areas represent the regimes in which there is bistability for only one of the incidence directions. As β increases, the second bistable region, seen at $\beta = 0$, is displaced to values of $|R_0|^2$ outside the intensity range displayed.

wave vectors there are two main ranges of incident intensities leading to high transmission in the case of a nonsaturable nonlinearity. These ranges coalesce for intermediate wave vectors. For large incident wave intensities, there is no transmission due to the unbounded nonlinear response. When the saturation of the nonlinearity is taken into account, the picture is modified substantially, except for low incident intensities where the saturation is ineffective. There appears a single band of transmission for high incident intensities. This

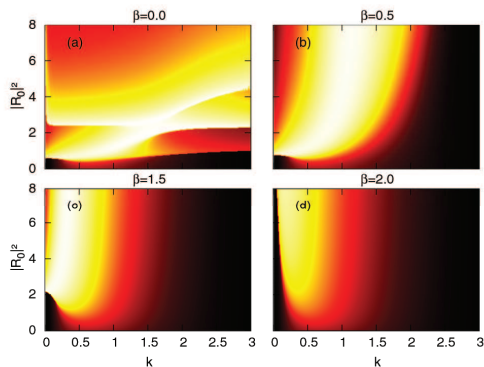


FIG. 5. (Color online) Color plot of the transmission coefficient of waves coming from the left of the nonlinear asymmetric dimer as a function of the wave vector k and the incident wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β . In the absence of saturation, there are two main intensity ranges with large transmission. These regions are distinct for short and long wavelengths, becoming superposed in the intermediate regime. In the presence of saturation, these bands coalesce. For high intensities, the single transmission band is associated with the effective linear behavior induced by saturation of the nonlinear response.

feature is related to the fact that the dimer becomes effectively linear due to the saturation of the nonlinear response. This band is displaced to smaller wave vectors as the saturation parameter β increases. For decreasing incident amplitudes, the transmission band depicts a drift towards smaller wavelengths until it reaches a characteristic intensity below which the transmission band is suppressed.

B. Saturation effect on the rectifying action

In order to provide a detailed description of the saturation effect on the diodelike action of the nonlinear dimer, we present in Fig. 6 a color plot of the rectifying factor as a function of the wave vector k and incident intensity $|R_0|^2$ for distinct saturation parameters β . In the regions exhibiting bistability, the rectifying factor is computed considering the modes with largest transmission coefficient in each direction. We concentrate on the regime of small saturation parameters because, as described in the previous results, there is only a small difference between the left and right transmission for high values of β , due to the absence of bistability. In the absence of saturation, there are branches of positive and negative rectifying factors, indicating that the diodelike action can have its direction tuned by changing the incoming wave intensity. A faint third branch of rectification appears at large wave vectors. Further, the rectifying action is less pronounced in the regime of intermediate wave vectors. Efficient rectification occurs at narrow ranges of wave intensities, especially for small wave vectors. Saturation plays distinct roles in the rectifying factor at small and large wavelengths. At small values of k , the first branch with negative values of f (efficient transport from right to left) is weakly affected by saturation. However, the branch with positive values of f (efficient transport from left to right) is strongly displaced to larger incident intensities while its range becomes wider. In the regime of large wave vectors, the first branch is also strongly affected by saturation, becoming wider and shifted to larger intensities. However, its rectifying

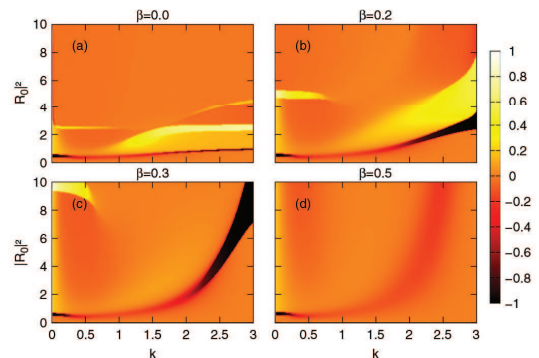


FIG. 6. (Color online) Color plot of the rectifying factor f as a function of the wave vector k and incident wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β . Rectifying action is less pronounced at intermediate wave vectors. As β increases, the regions of negative and positive rectifying factor depict distinct trends (see text).

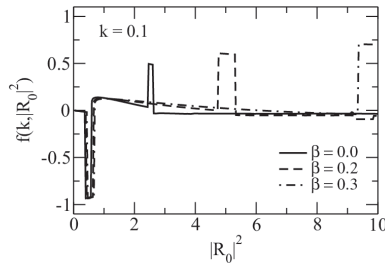


FIG. 7. Rectifying factor f as a function of the incident wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β and a small wave vector $k = 0.1$. The range of intensities of bistable behavior increases with β in both windows and is displaced to larger values of $|R_0|^2$. However, while f slightly decreases with β in the first bistability window, it shows the opposite increasing behavior in the second window. The discontinuous jumps in f signal the emergence of bistable behavior for left and right incidences.

action seems not to be weakened by saturation. On the other hand, the second branch becomes fainter as β increases.

To quantify the saturation influence on the rectifying action, we show the dependence of f on the incident wave intensity for two representative values of the wave vector: $k = 0.1$ (Fig. 7) and $k = 3.0$ (Fig. 8). For $k = 0.1$, the rectifying factor in the first branch is only slightly reduced as β increases, remaining close to unity, while the intensity range exhibits a small displacement and broadening. The second rectification branch is strongly sensitive to β . The range of intensities in which it occurs is enlarged and displaced quite quickly as β increases. However, the rectification factor becomes larger. At large wave vectors (see Fig 8), all rectification branches are strongly affected by saturation, in the sense that their intensity ranges becomes much wider and they are strongly displaced. However, while the rectifying factor remains very close to unity in the first branch, corresponding to an efficient transmission from right to left, it is suppressed by saturation in the second branch. It is important to stress that

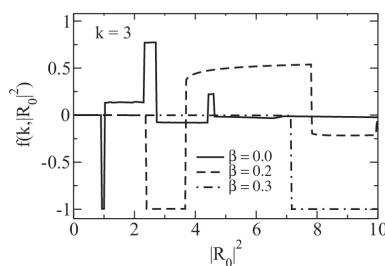


FIG. 8. Rectifying factor f as a function of the incident wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β and a large wave vector $k = 3.0$. While the almost perfect rectifying action is mainly independent of β in the first bistability window, it is suppressed in the second window in the presence of saturation of the nonlinear response.

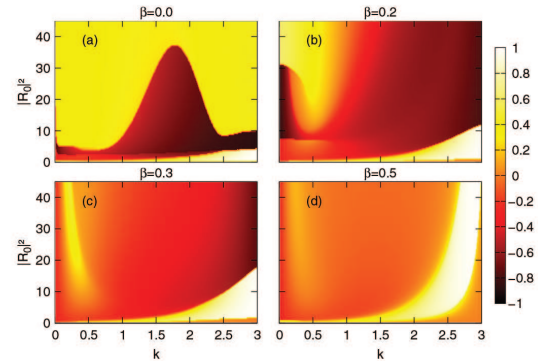


FIG. 9. (Color online) Color plot of the rectifying factor f as a function of the wave vector k and incoming wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β for the case of a dimer with an asymmetric nonlinear profile. Notice that rectifying action is more pronounced at large wave vectors (lighter and darker regions).

the discontinuous jumps exhibited by the rectification factor signal the emergence of bistability in each incidence direction.

Before finishing, we would like to call attention that the rectifying action can also be obtained for dimers with just an asymmetric nonlinearity, instead of an asymmetric on-site potential. We illustrate this feature by showing some representative results for the rectifying factor in the particular case of $V_1 = V_2 = -2.5$, $\alpha_1 = 0.5$, and $\alpha_2 = 1.5$. The color

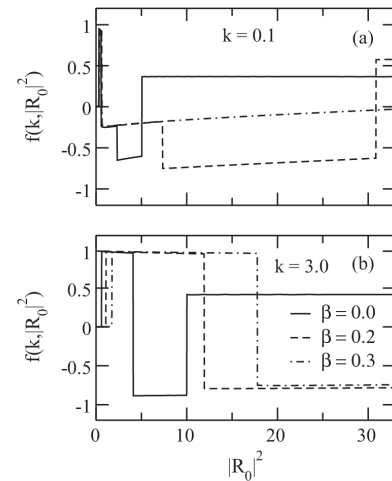


FIG. 10. Rectifying factor f as a function of the incident wave intensity $|R_0|^2$ for distinct values of the saturation parameter β for the case of a dimer with asymmetric nonlinearity. (a) $k = 0.1$: In this case the rectifying factor assumes only intermediate values. (b) $k = 3.0$: Almost perfect rectifying action is achieved for both left and right incidences. The ranges corresponding to large values of f widen and are displaced to larger intensities as the saturation parameter increases.

plot of the rectifying factor as a function of $|R_0|^2$ and k for distinct values of the saturation parameter β is shown in Fig. 9. Here, the rectifying action takes place at larger values of $|R_0|^2$ when compared with the case of an asymmetric on-site potential because asymmetry is present only in a higher-order term. In the absence of saturation, $\beta = 0$, a predominant transmission of waves coming from the right (negative values of f) is observed in the entire spectrum of wave vectors, although it becomes more pronounced at large values of k (darker region). The width of intensities leading to rectifying action is maximum in the regime of intermediate wave vectors. On the other hand, predominant left to right transmission (positive values of f) is achieved mainly for incoming waves with large wave vectors. Saturation of the nonlinear response widens and displaces the range of intensities leading to such rectifying action. Figure 10 illustrates more clearly the above features. At low wave vectors [Fig. 10(a)] there is not an efficient rectifying action, with f assuming intermediate values. On the other hand, almost perfect left-to-right, as well as right-to-left rectification takes place at large wave vectors in ranges of incoming intensities that increase in the presence of saturation.

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

In summary, we considered a nonlinear dimer coupled to linear side chains and characterized the influence of the saturation of the nonlinear response on the nonreciprocal transmission of harmonic signals. Using a set of discrete nonlinear Schrödinger equations to model the wave transmission through the dimer and a backward iterative process to relate the amplitudes of the incident and transmitted waves, we analytically computed the transmission coefficient and the relative rectifying factor as a function of the incoming wave vector and transmitted intensity.

We found that the bistable behavior that favors a strong rectifying action is suppressed in the presence of saturation

because the dimer becomes effectively linear for large incident intensities. However, a weak saturation parameter can have a positive influence on the nonreciprocal transmission. First, it enlarges the intensity ranges in which bistability occurs, thus leaving the rectifying action more robust against intensity variations. In the first rectification branch, the saturation effect does not compromise the contrast between the transmission of left and right incident waves. For waves with long wavelengths (small wave vector k), the first rectification branch is actually only weakly affected by the saturation of the nonlinear response, while the rectifying factor increases in the second branch as it is substantially displaced and enlarged. For waves with short wavelengths, saturation enlarges and substantially displaces the rectification branches. However, while in the first branch the rectifying factor remains almost unitary even in the presence of saturation, it is reduced in the other branches. Therefore, the first rectification branch appears as the most adequate to explore the diodelike action of the nonlinear dimer. A weak saturation effect of the nonlinear response, which means the excitation of higher-order susceptibilities, leads to a wider range of wave intensities having large rectifying factors for both small and large wavelengths. Further, we showed that rectifying action can also be obtained in dimers having an asymmetric profile of the nonlinear coefficient. In this case, diodelike transmission is more effective for large-wave-vector incoming signals. It would be interesting to have future contributions aiming to explore other small asymmetric structures with saturable nonlinearity that can simultaneously optimize transmission and rectification over the entire spectral range.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by the Brazilian Research Agencies CAPES, FINEP, and CNPq, as well as by the Alagoas state research agency FAPEAL.

-
- [1] D. Hennig and G. P. Tsironis, *Phys. Rep.* **307**, 333 (1999).
 - [2] G. Wellein and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **58**, 6208 (1998).
 - [3] A. S. Mishchenko and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036402 (2004).
 - [4] F. A. B. F. de Moura, I. Gleria, I. F. dos Santos, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 096401 (2009).
 - [5] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
 - [6] G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics* (Academic Press, San Diego, 1995).
 - [7] Y. V. Kartashov, B. A. Malomed, and Lluís Torner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 247 (2011).
 - [8] A. Hasegawa, *Rep. Prog. Phys.* **65**, 999 (2002).
 - [9] S. Flach and A. V. Gorbach, *Phys. Rep.* **467**, 1 (2008).
 - [10] V. E. Zakharov and L. A. Ostrovsky, *Physica D* **238**, 540 (2009).
 - [11] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl, *Science* **314**, 1121 (2006).
 - [12] T. Sun, J. X. Wang, and W. Kang, *Europhys. Lett.* **105**, 16004 (2014).
 - [13] Y. Wang, A. Vallabhaneni, J. N. Hu, B. Qiu, Y. P. Chen, and X. L. Ruan, *Nano Lett.* **14**, 592 (2014).
 - [14] X. F. Li, X. Ni, L. A. Feng, M. H. Lu, C. He, and Y. F. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 084301 (2011).
 - [15] N. Boechler, G. Theocharis, and C. Daraio, *Nat. Mater.* **10**, 665 (2011).
 - [16] B. Yuan, B. Liang, J. C. Tao, X. Y. Zou, and J. C. Cheng, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 043503 (2012).
 - [17] K. Gallo, G. Assanto, K. R. Parameswaran, and M. M. Fejer, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 314 (2001).
 - [18] L. Fan, J. Wang, L. T. Varghese, H. Shen, B. Niu, Y. Xuan, A. M. Weiner, and M. H. Qi, *Science* **335**, 447 (2012).
 - [19] D. Roy, *Phys. Rev. B* **81**, 155117 (2010).
 - [20] H. Lira, Z. F. Yu, S. H. Fan, and M. Lipson, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 033901 (2012).
 - [21] M. W. Feise, I. V. Shadrivov, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. E* **71**, 037602 (2005).

- [22] S. Lepri and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 164101 (2011).
- [23] S. V. Zhukovsky and A. G. Smirnov, *Phys. Rev. A* **83**, 023818 (2011).
- [24] N. Bender, S. Factor, J. D. Bodyfelt, H. Ramezani, D. N. Christodoulides, F. M. Ellis, and T. Kottos, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 234101 (2013).
- [25] S. Gatz and J. Herrmann, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 2296 (1991).
- [26] M. L. Lyra and A. S. Gouveia-Neto, *Opt. Commun.* **108**, 117 (1994).
- [27] X. Zhong and A. Xiang, *Opt. Fiber Technol.* **13**, 271 (2007).
- [28] K. Nithyanandan, R. V. J. Raja, K. Porsezian, and T. Uthayakumar, *Opt. Fiber Technol.* **19**, 348 (2013).
- [29] G. L. da Silva, I. Gleria, M. L. Lyra, and A. S. B. Sombra, *J. Opt. Soc. Am. B* **26**, 183 (2009).
- [30] M. L. Lyra and A. S. Gouveia-Neto, *J. Mod. Opt.* **41**, 1361 (1994).
- [31] S. Hu and W. Hu, *Physica B* **429**, 28 (2013).
- [32] P. Cao, X. Zhu, Y. J. He, and H. G. Li, *Opt. Commun.* **316**, 190 (2014).
- [33] D. Guzmán-Silva, C. Lou, U. Naether, C. E. Rüter, D. Kip, and R. A. Vicencio, *Phys. Rev. A* **87**, 043837 (2013).
- [34] W. Shi, S. Shige, Y. Soga, M. Sato, and A. J. Sievers, *Europhys. Lett.* **103**, 30006 (2013).
- [35] M. R. Samuelsen, A. Khare, A. Saxena, and K.Ø. Rasmussen, *Phys. Rev. E* **87**, 044901 (2013).

Phase-shift-controlled logic gates in Y-shaped nonlinearly coupled chains

T. F. Assunção,¹ E. M. Nascimento,¹ A. S. B. Sombra,² and M. L. Lyra¹

¹*Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-900, Maceió-Alagoas, Brazil*

²*Laboratório de Telecomunicações e Ciência e Engenharia de Materiais LOCEM, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60455-760, Fortaleza-Ceará, Brazil*

(Received 28 July 2015; revised manuscript received 7 December 2015; published 25 February 2016)

We introduce a model system composed of two input discrete chains nonlinearly coupled to a single output chain which mimics the geometry of Y-shaped carbon nanotubes, photonic crystal wave guides, and DNA junctions. We explore the capability of the proposed system to perform logic gate operations based on the transmission of phase-shifted harmonic incoming waves. Within a tight-binding approach, we determine the exact transmission spectrum which exhibits a nonlinear induced bistability. Using a digitalization scheme of the output signal based on amplitude modulation, we show that AND, OR, and XOR logic operations can be achieved. Nonlinearity strongly favors the realization of logic operations in the regime of large wavelengths, while phase shifting is required for the OR logic gate to be realizable. A detailed analysis of the contrast ratio shows that optimal operation of the AND and OR logic gates takes place when the nonlinear response is the predominant physical property distinguishing the coupling and regular sites. These results point towards the possibility of Y-branched junctions to perform logic operations based on the transmission of traveling waves.

DOI: 10.1103/PhysRevE.93.022218

I. INTRODUCTION

The study of wave transport through quasi-one-dimensional channels is relevant for several branches of physics with potential implications in the design and performance of optical, acoustical, magnetic, and electronic devices [1]. In this context, junctions of quasi-one-dimensional channels play an important role as they allow the physical realization of several fundamental computing operations. Among the most important basic computing devices, logic gates are switches whose binary output state depends on the input condition. They are fundamental components performing arithmetic and logic functions [2].

Within the context of telecommunications, there are several proposals of all-optical logic devices based in coupled fibers [3–5] and structured photonic crystals [6–8]. Recently the realization of the AND, XOR, and NOT logic gates in Y-shaped designed photonic crystal wave guides was proposed [9–11]. In these systems, the operation characteristics can be manipulated by filling holes in the junction region with optical materials having distinct refractive indices as well as nonlinear Kerr responses. In this way, both refractive index mismatch and the nonlinear characteristics of the coupling region can be explored to achieve prespecified transmission properties.

Y-branched carbon nanotubes have also been shown to have electrical characteristics that can be explored in the design of nanoelectronic devices [12,13]. Carbon-nanotube-based electronics has been considered as a potential alternative to the silicon-based technology. The experimental realization of switching and logic operations in these systems has opened the possibility of a new class of nanoelectronic architectures and functionalities [13], which can be tuned by changing the topology of the junction or by localized ion implantation [14]. Electronic transport measurements on multiwalled Y-junctions [15], as well as quantum conductivity calculations [16–18], showed that they behave as intrinsic nonlinear devices. Nonlinearity can also arise from the coupling with phonons that promotes the self-trapping of electronic states [19–21].

It can lead to an asymmetric wave propagation that enables the realization of a diode-like behavior [22–24] that has been explored in many physical contexts [25–30]. Y-junctions have also been explored for the possible realization of magnonic logic operations [31–34] and computing devices based on complex DNA-based structures [35–38].

Several studies of wave transmission along coupled channels have been performed within the context of the discrete nonlinear Schrödinger equation (DNSE) [22–30] whose coefficients can describe both linear and nonlinear properties of the main chains and the junction region. Besides describing several physical situations, DNSEs can be used to model simple dynamical systems that can be analytical solved, thus allowing for a systematic analysis of the influence of the relevant physical parameters on the transmission characteristics. In particular, the conductance through a Y-junction has been computed within the framework of semi-infinite discrete chains coupled by single atom and hexagonal spacers [17,18]. It has been demonstrated that this simple approach provides important insights on the behavior of networks of carbon nanotubes. DNSEs have been also used to model the electronic transport along DNA segments [39–41] and photonic multilayers [22,23]. Although the DNSE is mainly used to study wave propagation along a nonlinear chain, it has been recently explored to study wave transmission between linear chains which are coupled by a nonlinear medium [22–24]. Here we will consider an approach similar to the latter one.

In the present work, we will explore the capability of a Y-shaped structure to perform distinct logic functions having harmonic incoming waves traveling on two input channels that, after interacting at a nonlinear site, are partially transmitted through an output channel. Within a tight-binding formulation to describe the wave propagation along the discrete chains and considering an effective third-order nonlinearity acting on the coupling site, we will determine the transmission spectrum as a function of the nonlinearity strength, the mismatch between the potential on the main chains and on the coupling site. We

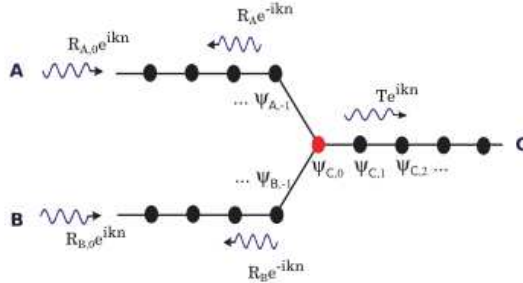


FIG. 1. Sketch of the studied device model system. Two semi-infinite linear input chains A and B meet at the nonlinear site (red, or gray in print). These are coupled with a third linear output chain C of similar characteristics. The on-energy is nonvanishing only at the nonlinear coupling site.

will also show that the spectrum of possible logic functions can be enlarged by tuning the relative phase between the input waves, thus allowing the realization of AND, OR, and XOR logic operations.

II. MODEL AND FORMALISM

We will focus on the transmission properties of a device model system composed of nonlinearly coupled semi-infinite chains, with particular emphasis on its capability of operating as a logical gate. The system consists of two input semi-infinite chains A and B which are nonlinearly coupled to an output chain C (see Fig. 1). Within a tight-binding approach, the amplitudes of stationary waves at the sites of the input and output chains satisfy a set of discrete Schrödinger equations in the form

$$\omega\psi_{j,n} = -\psi_{j,n-1} - \psi_{j,n+1}, \quad (1)$$

where $j = A, B, C$ distinguishes the semi-infinite chains, $n < 0$ for the input chain and $n > 0$ for the output chain. The coupling site $n = 0$ is shared by all channels, i.e., $\psi_{A,0} = \psi_{B,0} = \psi_{C,0} = \psi_0$. Here we have set the on-site potential at the sites of the input and output chains as the zero reference energy and used unitary hopping amplitudes without loss of generality. Further $\omega = -2 \cos k$ according to the dispersion relation of harmonic waves with wave vector k , with the lattice spacing acting as the typical length scale. Additionally, the wave function amplitude at the coupling site will be considered to satisfy a discrete nonlinear Schrödinger equation given by

$$\omega\psi_0 = V_0\psi_0 - \psi_{A,-1} - \psi_{B,-1} - \psi_{C,+1} + \alpha|\psi_0|^2\psi_0, \quad (2)$$

where we assumed a typical Kerr third-order nonlinearity with strength parameter α . The on-site energy V_0 accounts for the distinct linear contribution of the coupling site as compared to the sites of the input and output chains. In a possible photonic crystal realization, the distinct parameters of the coupling site account for the refractive index mismatch and the nonlinear Kerr response of the optical material filling holes located in the junction region [9–11]. Within the context of carbon nanotube junctions, they can mimic the distinct electronic properties of the junction, including the effect of defects and implanted

dielectric particles [13,14]. In the following, we are going to detail the transmission spectrum as a function of the pair of parameters (α, V_0) characterizing the coupling site.

When plane waves of wave vector k are inserted through the input chains A and B , they suffer scattering at the coupling site. A fraction of them is transmitted to the output channel while the remaining component is reflected. The wave function amplitude at each site can, therefore, be written in the form

$$\psi_{j,n} = \begin{cases} R_{j,0}e^{ikn} + R_j e^{-ikn}, & n \leq 0 \ (j = A, B), \\ T e^{ikn}, & n \geq 0. \end{cases} \quad (3)$$

We denoted the amplitudes of the incident and reflected waves on the input channel by $R_{j,0}$ and R_j ($j = A, B$). T is the amplitude of the wave component transmitted to the output channel C (see Fig. 1).

In order to explore the possible logic gate action of the proposed system, we consider a simple digitalization scheme of the input waves. The absence of an input wave in a given channel will be considered as input bit 0 while its presence will represent the input bit 1. For the particular case on which there are input waves on both channels [representing the digital input (1,1)], we will restrict ourselves to the case on which they have the same amplitude, i.e., $|R_{A,0}| = |R_{B,0}| = |R_0|$. However, they will be considered to be phase shifted with $R_{B,0} = R_{A,0}e^{i\Delta\phi}$. Phase shifts are usually performed in optical couplers by the introduction of delay lines. It has been shown that phase shifting the input signals can potentially extend the parameter regions on which logical operations can be achieved [3].

To determine the transmission coefficient $t = |T|^2/|R_0|^2$, it is more convenient to solve the problem from the perspective of a fixed output amplitude T by employing backward recursive iterations to obtain the incident amplitude R_0 [1,22,24]. Therefore, considering $\psi_1 = T e^{ik}$ and $\psi_0 = T$, one can write Eq. (2) as

$$\psi_{-1} = (V_0 - \omega + \alpha|T|^2)\psi_0 - \psi_1, \quad (4)$$

where $\psi_{-1} = \psi_{A,-1} + \psi_{B,-1}$. It is straightforward to show that, in either case, the input amplitude R_0 can be put in the form

$$R_0 = \frac{\psi_{-1} - 2\psi_0 e^{ik}}{\xi(e^{-ik} - e^{ik})}, \quad (5)$$

where $\xi = 1 + e^{i\Delta\phi}$ when there are incoming waves on both channels and $\xi = 1$ when the incident wave comes along a single channel. From Eq. (4) and Eq. (5) we get the transmission coefficient,

$$t(k, |T|^2) = \frac{|T|^2}{|R_0|^2} = \frac{|\xi(e^{-ik} - e^{ik})|^2}{|v - 3e^{ik}|^2}, \quad (6)$$

where $v = V_0 - \omega + \alpha|T|^2$. Equation (6) can be inverted to actually leave R_0 as the free parameter.

The logic signal in the output channel will be considered to follow an amplitude modulation scheme. To this end, we will consider an output wave to represent bit 1 whenever the transmission coefficient is above a chosen threshold t_0 and bit 0 when it is below threshold. In the following, we will show results for the particular choice of a transmission threshold $t_0 = 0.25$. The results we are going to report concerning the

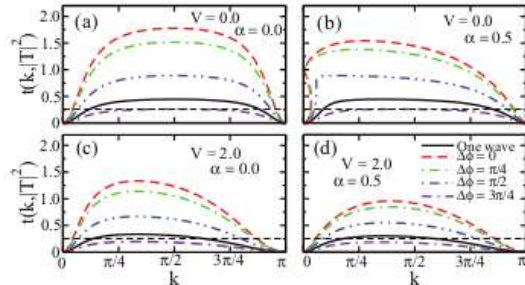


FIG. 2. Transmission coefficient as a function of the wave vector for both zero (a, b) and large (c, d) on-site energy for the cases of linear (a, c) and nonlinear (b, d) coupling. The solid black line corresponds to the case of a single channel input. The colored dashed lines are for the cases of waves coming from both input channels with distinct phase shifts. The reference threshold transmission is signaled by the dashed straight black line. For intermediate values of k , the transmission coefficient is maximum, decreasing to zero at $k = 0$ and $k = \pi$. The coupling through a nonlinear site with small on-site energy can lead to bistability with an additional mode with $t \neq 0$ at $k = 0$. This feature gives rise to logic operations at small k not reachable for linearly coupled chains.

possible logic gate operations remain qualitatively the same for other choices of t_0 . Table I summarizes the digitalization scheme used in the present work for both input and output signals.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

To start our discussion, we calculated the transmission coefficient spectrum $t(k)$ for a reference input wave intensity $|R_0|^2 = 2.0$ for both linear ($\alpha = 0$) and nonlinear ($\alpha = 0.5$) cases. We also considered two distinct values of the on-site energy at the coupling site, as seen in Fig. 2. In Figs. 2(a)–2(d), the black solid lines represent the transmission resulting from the case of an incident wave coming from a single input channel [digital inputs (1,0) or (0,1)]. The colored dashed lines are due to input waves coming from both channels [digital input (1,1)] with phase shift $\Delta\phi$. For all cases, the transmission is maximum at intermediate values of k , being zero at $k = 0$ and $k = \pi$ as expected. The transmission coefficient continuously decreases as a function of the phase shift. For small values of the on-site energy, the presence of nonlinearity induces the emergence of a bistable behavior. Therefore, there are

TABLE I. Digitalization scheme for the input and output signals. Input bit 1 (0) corresponds to the presence (absence) of an incoming wave. Output bit 1 (0) corresponds to a transmission coefficient above (below) a threshold level t_0 .

Input		Output	
Bit	Condition	Bit	Condition
1	$R_0 \neq 0$	1	$t(k, T ^2) \geq 0.25$
0	$R_0 = 0$	0	$t(k, T ^2) < 0.25$

TABLE II. Truth table of the logic operations AND, XOR, and OR. Within the present digitalization scheme of the input signal, the input (0,0) represents the absence of incoming waves and, thus, it has always bit 0 as output. Further, due to the symmetry of the system, the inputs (1,0) and (0,1) have identical outputs. These features restrict the set of logical gates that can be realized.

Logic Input		Logic Output		
A	B	AND	OR	XOR
0	0	0	0	0
0	1	0	1	1
1	0	0	1	1
1	1	1	1	0

modes of large transmission at small k for small values of $\Delta\phi$ [see Fig. 2(b)]. From Eq. (6) it can be demonstrated that when the parameters allow for an additional mode at $k = 0$, its transmission is $t(0) = (1 - V_0)/\alpha |R_0|^2$ [$t(0) = 1$ for the parameters considered in Fig. 2(b)]. Such a mode is present in the regime of small phase shifts and large nonlinearities (usually when the nonlinear contribution is large when compared with the on-site energy). Notice that at large values of V_0 , a weak nonlinearity is not able to promote the emergence of bistability [see Fig. 2(d)]. The reference threshold transmission $t_0 = 0.25$ is shown as a black dashed line. It is important to stress that the emergence of a bistable regime opens a window to achieve logic operations in the small wave vector regime that is not possible for linearly coupled chains.

Following the input digitalization scheme summarized in Table I and the output digitalization based on the amplitude modulation with transmission threshold t_0 , we identify three possible logic operations, namely, AND, XOR, and OR, whose truth table is illustrated in Table II.

In Fig. 3 we show the regions in the parameters space ($k, \Delta\phi$) on which each logic operation is achieved for some representative values of the nonlinear coupling. Here we consider the particular case of $V_0 = 0$ at which the nonlinear effects are more prominent. Region I corresponds to the AND gate operation, i.e., the transmission is above threshold only when incoming waves are present in both input channels. The OR gate is reachable in region II at which the transmission is above threshold for both single and double incoming waves. Finally, region III corresponds to the XOR logic gate, i.e., the transmission coefficient is above threshold only if there is an incoming wave in a single input channel. The white region is not associated with any logic operation, having transmission below threshold for all combinations of input signals. The color scale on regions I and III refers to a measure of the contrast ratio (CR) between the output bits 1 and 0 defined as

$$\text{CR} = 10 \log_{10} \frac{t_1}{t_0}, \quad (7)$$

where t_1 and t_0 refer the transmission coefficients of the logic answers 1 and 0, respectively. This is an important measure that characterizes the effectiveness of logic operations. Large values of the contrast ratio imply that the output signals are well separated from the decision line and, therefore, the digitalization process becomes more robust

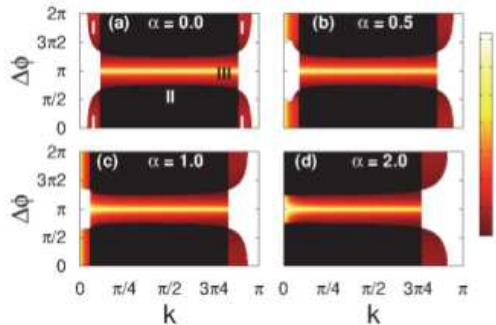


FIG. 3. Contrast ratio as function of the phase shift and wave vector for some representative values of the nonlinear coupling and $V_0 = 0$. Region I corresponds to AND, II to OR, and region III to XOR logic gates. (b, c) The presence of a weak nonlinearity favors the emergence of the AND logic gate at small k , as well as to an increase of the contrast ratio. The logic gates at larger k are less sensitive to the presence of nonlinearity. (d) For strong nonlinearities, OR and XOR gate operations are reachable at small k .

against noise and processing errors. Within the present input digitalization scheme, CR is not computable for the OR logical gate.

Figure 3 unveils several aspects concerning the capability of the present device model system to perform logic operations. First, it clearly shows that phase shifting the input signals is required to reach XOR operation. Further, all three AND, OR, and XOR operations are accessible in the case of linearly coupled channels. However, they do not persist in the regime of small wave vectors, i.e., for incoming waves with wavelength much larger than the lattice spacing. Concerning this point, the bistability resulting from a nonlinear coupling can overcome this limitation. A weak nonlinearity promotes the AND gate operation at small k , as evidenced in Figs. 3(b) and 3(c). As the nonlinear coupling increases, bistability also appears when there is an incoming wave on a single input channel. As a result, instead of the AND gate, XOR and OR gates are reachable at small wave vectors depending on the phase shift, as shown in Fig. 3(d). Notice that the nonlinearity has a weaker impact of the logic operation in the large k (small wavelength) regime. At very large nonlinearities (not shown), the transmission through the coupling site is compromised and no logic operation persists.

To provide additional information regarding the influence of the distinct model parameters, we show in Fig. 4 the regions of AND and OR logic gates in the (V_0, k) space for different values of the nonlinear coefficient in the absence of phase shift. In the case of a linear coupling, there is no significant logic operation at small wave vectors, except in the close vicinity of $V_0 = 1$, which corresponds to a resonant solution with transmission $t(0) = 4/9$. The logic regions enlarge as k increases, achieving their maxima at intermediate k . Observe that for both small values of wave vector and on-site energy, a small nonlinearity strongly influence the transmission spectrum and favors the formation of the AND logic gate. Notice that the nonlinearity has a much weaker influence on the large k regime. However,

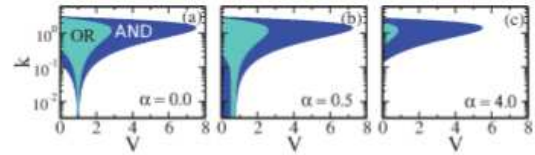


FIG. 4. AND (dark blue) and OR (light blue) gates operation regions as a function of the wave vector and on-site energy for different nonlinear couplings and no phase shifting. (a) For the linear case, logic gates at small k appear only near the resonance at $V = 1$. (b) A weak nonlinearity enhances the AND gate region at small k . (c) A large nonlinearity strongly suppresses the ability to perform logical operations.

very high values of nonlinearity suppress the transmission, thus reducing the system ability to perform any logic operation.

Before finishing, let us explicitly discuss the efficiency of the AND and XOR gates by plotting their corresponding contrast ratio for some illustrative cases. As indicated in Fig. 3 for the case of $V_0 = 0$, the presence of intermediate values of nonlinearity favors the increase of the CR for the AND gate in the regime of small k . This characteristic is directly related to the bistability. It is absent in the regime of large k where CR decreases when the nonlinearity increases. For the XOR gate, Fig. 3 shows a weaker dependence of the CR on the wave vector k , although pointing to a slightly better contrast in the regime of small wave vectors.

In Fig. 5 we illustrate the relation between the CR and the wave vector k for the particular value of the phase shift $\Delta\phi = \pi/3$ corresponding to the realization of the AND logical operation at small and large k . Notice that the two bands depict quite distinct contrast levels, with the one at small k presenting the best efficiency for $V_0 = 0$. This trend is reversed for $V_0 = 1.0$ although both bands exhibit similar contrast levels. Notice also that, in both cases, the CR in the small k band is larger when a nonlinear coupling is considered. Figure 6 shows a similar analysis for $\Delta\phi = 5\pi/6$ corresponding to the XOR logical gate. At $V_0 = 0$, the CR continuously decreases as a function of the wave vector k . It is interesting to stress that at large wave vectors, the CR for the nonlinearly coupled device

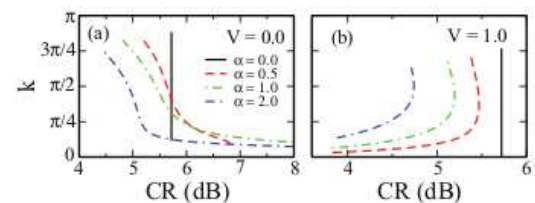


FIG. 5. Relation between the wave vector k and the contrast ratio of the AND gate at $\Delta\phi = \pi/3$ for different values of nonlinearity. (a) For $V_0 = 0$, intermediate values of nonlinearity increase the contrast ratio at small wave vectors due to the development of bistability. For large values of k , the CR decreases when the nonlinearity increases. (b) For $V = 1$, larger contrast ratio develops at large k , although it decreases for strong nonlinearities.

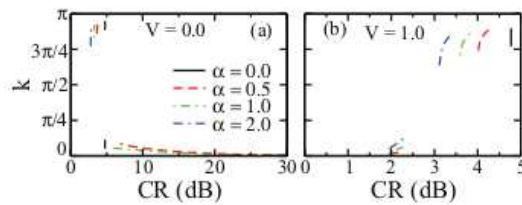


FIG. 6. Relation between the wave vector and the contrast ratio of the XOR gate at $\Delta\phi = 5\pi/6$ for different values of nonlinearity. (a) For $V_0 = 0$, higher contrast ratio occurs in small k . It is enhanced in nonlinearly coupled chains. On the other hand, nonlinearity degrades the CR in the large k regime. (b) For $V_0 = 1.0$, the contrast ratio depends nonmonotonically on k , being maximum in the limiting case of linearly coupled chains.

is smaller than that corresponding to the case of linear coupling whose contrast is shown as a vertical solid line. Similarly to the behavior observed for the AND gate, the CR at small wave vectors is improved in the presence of a nonlinear coupling. For $V_0 = 1.0$, the CR is always smaller in the nonlinear regime and develops a nonmonotonic dependence on k .

IV. SUMMARY AND CONCLUSION

In summary, we demonstrated that a three-channel device model consisting of three nonlinearly coupled identical discrete linear chains can perform distinct logic operations based on a digitalization scheme of input and output harmonic waves. Within a tight-binding description and considering a third-order nonlinear contribution acting only in the coupling site, we determined the exactly transmission spectrum through the output channel for the case of an input harmonic wave coming from a single channel [representing the input binary signal (1,0)], as well as for the case of phase-shifted signals coming from both input channels [representing the binary input signal (1,1)]. By using an amplitude modulation scheme

based on a threshold transmission level distinguishing output bits 0 and 1, we showed that AND, OR, and XOR logic gates can be performed by the proposed model structure. We demonstrated that, while a weak nonlinearity favors the realization of the AND gate at small wave vectors, OR and XOR gates predominate for strong nonlinearities, with the latter appearing at large phase shifts. We further evaluated the efficiency of the digitalization scheme by computing the contrast ratio between output signals 0 and 1 for the AND and XOR gates. These logic gates showed higher contrast levels in the small wave vector regime whenever the main contribution to the local potential at the coupling site comes from its nonlinear response.

It is interesting to stress out that the geometry of the model system considered in the present work has a close resemblance with Y-branched single wall carbon nanotubes [12–18], photonic crystal wave guides [9–11], as well as with DNA-based Y-junctions [35–38]. The results presented here show that Y-shaped structures can potentially perform several logic operations based on traveling waves. It would be interesting to extend the analysis reported here to include additional physical features as, for example, extended spacer regions, asymmetric spatial structures, and other multichannels configurations. Tight-binding calculations, along the lines presented here, can provide important analytical insights concerning the role played by specific physical parameters that can be explored in the design of new functional devices.

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank partial financial support from CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), FAPEAL (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas), and FUNCAP (Fundação Cearense de Amparo à Pesquisa).

- [1] D. Hennig and G. P. Tsironis, *Phys. Rep.* **307**, 333 (1999).
- [2] J. Millman and A. Grabel, *Microelectronics* (McGraw-Hill, New York, 1988).
- [3] W. B. Fraga, J. W. M. Menezes, M. G. da Silva, C. S. Sobrinho, and A. S. B. Sombra, *Opt. Commun.* **262**, 32 (2006).
- [4] P. Andalib and N. Granpayeh, *J. Opt. Soc. Am. B* **26**, 10 (2009).
- [5] N. Gogoi and P. P. Sahu, *Appl. Optics* **54**, 1051 (2015).
- [6] C. Husko, T. D. Vo, B. Corcoran, J. Li, T. F. Krauss, and B. J. Eggleton, *Opt. Express* **19**, 20681 (2011).
- [7] Y. Fu, X. Hu, and Q. Gong, *Phys. Lett. A* **377**, 329 (2013).
- [8] Y. P. Yang, K. C. Lin, I. C. Yang, K. Y. Lee, Y. J. Lin, W. Y. Lee, and Y. T. Tsai, *Opt. Commun.* **297**, 165 (2013).
- [9] P. Rani, Y. Kalra, and R. K. Sinha, *Opt. Commun.* **298-299**, 227 (2013).
- [10] P. Rani, Y. Kalra, and R. K. Sinha, *Optik* **126**, 950 (2015).
- [11] H. Wang, X. Yu, and X. Rong, *Opt. Eng.* **54**, 077101 (2015).
- [12] P. Nagy, R. Ehlich, L. P. Biro, and J. Gyulai, *Appl. Phys. A* **70**, 481 (2000).
- [13] P. R. Bandaru, C. Daraio, S. Jin, and A. M. Rao, *Nature Mater.* **4**, 663 (2005).
- [14] J. Park, C. Daraio, S. Jin, P. R. Bandaru, J. Gaillard, and A. M. Rao, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 243113 (2006).
- [15] C. Papadopoulos, A. Rakitin, J. Li, A. S. Vedenev, and J. M. Xu, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3476 (2000).
- [16] A. N. Andriotis, M. Menon, D. Srivastava, and L. Chernozatonskii, *Phys. Rev. B* **65**, 165416 (2002).
- [17] V. Meunier, M. B. Nardelli, and J. Bernhoic, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 5234 (2002).
- [18] G. Treboux, P. Lapstun, W. Zhanghua, and K. Silverbrook, *J. Phys. Chem. B* **103**, 8671 (1999).
- [19] U. Naether, A. J. Martinez, D. Guzman-Silva, M. I. Molina, and R. A. Vicencio, *Phys. Rev. E* **87**, 062914 (2013).
- [20] P. K. Datta and K. Kundu, *Phys. Rev. B* **53**, 14929 (1996).

- [21] D. H. Dunlap, V. M. Kenkre, and P. Reineker, *Phys. Rev. B* **47**, 14842 (1993).
- [22] S. Lepri and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 164101 (2011).
- [23] S. V. Zhukovsky and A. G. Smirnov, *Phys. Rev. A* **83**, 023818 (2011).
- [24] T. F. Assunção, E. M. Nascimento, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. E* **90**, 022901 (2014).
- [25] S. Lepri and A. Pikovsky, *Chaos* **24**, 043119 (2014).
- [26] B. Liang, B. Yuan, and J. C. Cheng, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 104301 (2009).
- [27] V. F. Nesterenko, C. Daraio, E. B. Herbold, and S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 158702 (2005).
- [28] M. W. Feise, I. V. Shadrivov, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. E* **71**, 037602 (2005).
- [29] S. Lepri and B. A. Malomed, *Phys. Rev. E* **87**, 042903 (2013).
- [30] D. N. Maksimov and A. F. Sadreev, *Phys. Rev. E* **88**, 032901 (2013).
- [31] P. Wadhwa and M. B. A. Jalil, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 2367 (2004).
- [32] Z. Chen, T.-Y. Lin, X. Wei, M. Matsunaga, T. Doi, Y. Ochiai, N. Aoki, and J. P. Bird, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 102403 (2012).
- [33] A. Khitun, *J. Appl. Phys.* **111**, 054307 (2012).
- [34] K. Vogt, F. Y. Fradin, J. E. Pearson, T. Sebastian, S. D. Bader, B. Hillebrands, A. Hoffmann, and H. Schultheiss, *Nat. Comm.* **5**, 3727 (2014).
- [35] P. A. Carr, G M. Church, *Nat. Biotechnol.* **27**, 1151 (2009).
- [36] C. Wu, S. Wan, W. Hou, L. Zhang, J. Xu, C. Cui, Y. Wang, J. Hu, and W. Tan, *Chem. Commun.* **51**, 3723 (2015) and references therein.
- [37] J. Zhu, L. Zhang, Z. Zhou, S. Dong, and E. Wang, *Anal. Chem.* **86**, 312 (2014).
- [38] R. M. Young, A. P. N. Singh, A. K. Thazhathveetil, V. Y. Cho, Y. Zhang, N. Renaud, F. C. Grozema, D. N. Beratan, M. A. Ratner, G. C. Schatz, Y. A. Berlin, F. D. Lewis, and M. R. Wasielewski, *JACS* **137**, 5113 (2015).
- [39] P. B. Ndjoko, J. M. Bilbault, S. Binczak, and T. C. Kofane, *Phys. Rev. E* **85**, 011916 (2012).
- [40] A. D. Koko, C. B. Tabi, H. P. E. Fouda, A. Mohamadou, and T. C. Kofane, *Chaos* **22**, 043110 (2012).
- [41] E. L. Albuquerque, U. L. Fulco, V. N. Freire, E. W. S. Caetano, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, *Phys. Rep.* **535**, 139 (2014).