



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

LUCIANO JOSÉ RÊGO BEZERRA JÚNIOR

**INSTABILIDADE MODULACIONAL EM CADEIA COM NÃO
LINEARIDADE SATURADA**

Maceió - AL
2021

LUCIANO JOSÉ RÊGO BEZERRA JÚNIOR

**INSTABILIDADE MODULACIONAL EM CADEIA COM NÃO
LINEARIDADE SATURADA**

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

Orientador: Prof. Wandearley da Silva Dias.

Maceió - AL

2021

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central

Bibliotecário Responsável: Jone Sidney A. de Oliveira CRB-4 - 1485

B574i Bezerra Júnior, Luciano José Rêgo.
Instabilidade modulacional em cadeia com não linearidade saturada / Luciano José Rêgo Bezerra Júnior. – 2021.
62 f. : il.

Orientador: Wandearley da Silva Dias.
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas.
Instituto de Física. Programa de Pós- Graduação em Física. Maceió, 2021.

Bibliografia: f. 47-54.
Apênces: f. 55-62
1. Instabilidade Modulacional. 2. Equação de Schrödinger. 3. Equação Não Linear. I. Título.

CDU: 530.182

“Um corpo que não vibra, desgraça, é um esqueleto que se arrasta”

PapaMike - Força e Honra

Agradecimentos

Nos últimos tempos, nos deparamos com momentos difíceis. Diante de uma pandemia, fomos obrigados a ficar em casa em isolamento social. Mesmo assim, pessoas especiais tornaram esse período mais razoável. Primeiramente, gostaria de agradecer a minha família por todo o apoio e alento, sem dúvidas os mais importantes da minha vida. Em seguida quero agradecer a minha namorada, que me dá muito carinho e apoio, que me deixa vários bilhetes como: “Amor, dê o seu melhor! E vai dar tudo certo! Te amo!”, que conversa comigo e me ajuda muito nos momentos difíceis. Obrigado meu amor.

Tenho também que agradecer a todos os meus amigos, que sempre me aturaram e me ampararam. Os amigos de infância e os que conheci durante a minha passagem pela UFAL, todos vocês são muito importantes para mim e fazem parte disso. Todos têm sua contribuição e me ajudaram a dar mais esse passo para essa nova conquista. Muito obrigado, amo vocês.

Também gostaria de agradecer aos membros do TIQNano, o grupo ao qual faço parte. Todas as semanas tivemos reuniões muito produtivas, com seminários e conversas, com direito a muita informação, orientação e boas risadas. Em especial, meu muito obrigado ao professor Wandearley, que me orienta desde a graduação e me ensina como devo caminhar para me tornar um futuro pesquisador. Quero agradecer também aos Paladinos do χ , subgrupo do TIQNano, onde falamos sobre não linearidade e outros assuntos. Neste subgrupo estão presentes o professor Frederico Passos, do IFAL, e Denilson de Moraes, aluno da pós-graduação da Ufal. Muito obrigado pelos riquíssimos diálogos sobre ciência.

Meus agradecimentos também vai para todos os professores do instituto de física da Ufal que contribuíram com minha formação. Aos professores Wagner Ferreira, Carlos Jacinto, Iram Gléria e Tiago Mariz, pelos conhecimentos obtidos nas disciplinas ministradas na pós-graduação.

A CAPES, FAPEAL e a CNPQ pelo apoio financeiro. Muito obrigado.

Resumo

Fenômenos não lineares, como instabilidade modulacional (IM) e auto-armadilhamento, estão presentes em alguns sistemas físicos tais como nas áreas de óptica, condensado de Bose-Einstein e física de plasma. Podemos observar IM em meios não lineares com efeitos dispersivos, ocorrendo quando adicionamos uma pequena perturbação na amplitude da função de onda e essa é amplificada. Já é estabelecido para uma cadeia sem saturação que o parâmetro de acoplamento não linear crítico acima do qual ocorre IM decai com o inverso do tamanho da cadeia. Com isto, usando o modelo de Holstein, o nosso objetivo é estudar a IM em um sistema não linear unidimensional, com não linearidade saturada. Para investigarmos a natureza desse fenômeno, resolvemos numericamente a equação de Schrödinger não linear discreta (ESNLD) com o auxílio do método numérico de Runge-Kutta de oitava ordem. Em nossos cálculos, fizemos uso da função participação, uma medida do grau de localização, e calculamos o módulo quadrado da função de onda, para observarmos o seu perfil. Resolvemos analiticamente a equação de Schrödinger não linear contínua, onde fizemos uma estimativa teórica para os valores críticos da não linearidade saturada. Encontramos que quando considerada a não linearidade saturada, o comportamento muda e esse parâmetro crítico decai com um termo proporcional ao inverso do tamanho da cadeia somado a outro termo que decai com o inverso do tamanho da cadeia ao quadrado. Mostramos também que o aumento da saturação promove o deslocamento dos parâmetros críticos de intensidade da não linearidade das transições já conhecidas no caso não saturado.

Palavras-chave: Instabilidade Modulacional. Equação Não Linear de Schrödinger. Não Linearidade Saturada.

Abstract

Nonlinear phenomena, such as modulational instability (MI) and self-trapping, are present in some physical systems such as in the areas of optics, Bose-Einstein condensate and plasma physics. We can observe MI in nonlinear media with dispersive effects, occurring when we add a small disturbance in the amplitude of the wave function and it is amplified. It is already established for a chain without saturation that the critical non-linear coupling parameter above which occurs MI decays with the inverse of the chain size. With this, using the Holstein model, our goal is to study MI in a one-dimensional nonlinear system, with saturated nonlinearity. To investigate the nature of this phenomenon, we solved the discrete nonlinear Schrödinger equation (DNLSE) numerically with the aid of the eighth-order numerical Runge-Kutta method. In our calculations, we used the participation function, a measure of the degree of localization, and calculated the square module of the wave function, to observe its profile. We solved the nonlinear continuous Schrödinger equation analytically, where we made a theoretical estimative for the critical values of the saturated nonlinearity. We found that when considering saturated nonlinearity, the behavior changes and this critical parameter decays with a term proportional to the inverse of the chain size plus another term that decays with the inverse of the chain size squared. We also show that the increase in saturation promotes the displacement of the critical parameters of intensity of the non-linearity of the transitions already known in the unsaturated case.

Keywords: Modulational Instability. Nonlinear Schrödinger Equation. Saturated Non-linearity.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Evidencia experimental da IM em águas profundas. Profundidade de 7.6 m e comprimento de onda fundamental de 2.2 m	11
Figura 2 – Instabilidade modulacional em ondas eletromagnéticas.	12
Figura 3 – Acima: Evolução de um trem de ondas não linear causado pela IM. Abaixo: A evolução do espectro da onda correspondente.	13
Figura 4 – Representação típica de um potencial periódico $U(x)$ para um sistema unidimensional. Todos os sítios são iguais, representados pelos pontos azuis e igualmente separados por uma distância a	14
Figura 5 – Do lado esquerdo: Representação da dispersão de um elétron em uma rede cristalina linear e unidimensional. Do lado direito: Simulação com tamanho de cadeia $x = 1000$ e evoluindo até $t = 2000$ passos. $ \psi(x, t) ^2$ é a amplitude de probabilidade de encontrarmos o elétron em uma região x da cadeia. No instante $t = 0$ temos o elétron com amplitude máxima e de acordo que o tempo t passa, a amplitude diminui até o elétron estar completamente espalhado pela cadeia.	15
Figura 6 – Do lado esquerdo: Representação da IM. Adicionamos um pequeno ruído, $\epsilon(x, t)$, no início da dinâmica, $t = t_0$, e a medida que o tempo passa, a dinâmica ocorre e temos a ocorrência da IM. Do lado direito: Simulação com tamanho de cadeia $x = 100$ e parâmetro $\chi = 0.280$	18
Figura 7 – Formação do trem de <i>soliton</i> a partir da IM. Figura A: Representação esquemática do fenômeno. IM resulta em um crescimento da pequena perturbação em uma escala de tempo $2\pi\xi$. Figura B: Formação do <i>soliton</i> para um parâmetro de espalhamento $a_f = -0.18a_0$ (onde a_0 é o raio de Bohr) e um tempo de espera (t_h) de $t_h = 0\text{ms}$ a $t_h = 20\text{ms}$. Cada imagem (de cima para baixo) corresponde a um diferente experimento. Figura C: Similar a figura B, contudo o parâmetro de espalhamento é $a_f = -2.5a_0$	19
Figura 8 – Representação do experimento em linhas de transmissão. A rede é composta por 80 células idênticas, com dois indutores L_1 e L_2 . A capacitância não linear $C(V_n)$ consiste em um diodo varicap (ou varactor) BB112, polarizado com uma tensão constante de $2V$ e conectado em paralelo com uma capacitância linear de $C_1 = 150\text{ pF}$	19

Figura 9 – Representação de uma cadeia de Holstein. Molécula diatômica formada por dois sítios (círculos azuis), ligados por uma mola. Elétron (círculo laranja) ao passar pela cadeia interage com a molécula diatômica formando o polaron. A distância entre moléculas é dado por \mathbf{a} e a separação internuclear x_j	22
Figura 10 – Simulação da transição entre regimes. Para alguns valores de χ , adicionamos um pequeno ruído [$\epsilon(x, t)$]: (a) Sistema estável, (b) ocorre a IM, (c) sistema evolui para o modo <i>breathing</i> , (d) oscilações irregulares e (e) <i>self-trapping</i>	29
Figura 11 – Reprodução da estimativa numérica do acoplamento característico de IM versus tamanho da cadeia. Em a) nossa reprodução e em b) figura dos autores.	33
Figura 12 – Dímero assimétrico e não linear.	35
Figura 13 – Evolução temporal da função participação normalizada. Para um tamanho de cadeia $N = 100$, uma função de onda inicialmente distribuída pela cadeia e $\chi = 0.195, 0.280$ e 4.500 . Em a) nossa reprodução e em b) figura dos autores.	38
Figura 14 – Evolução temporal da densidade de Probabilidade da função de onda. De (a – c) $\chi = 0.195$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 ; De (d – f) $\chi = 0.205$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 ; De (g – i) $\chi = 4.500$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 . Para uma cadeia com $N = 100$ sítios e evolução temporal até 50000 passos de tempo.	39
Figura 15 – Evolução temporal da função participação. De (a – c) $\chi = 0.195$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 ; De (d – f) $\chi = 0.205$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 ; De (g – i) $\chi = 4.500$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 . Para uma cadeia com $N = 100$ sítios e evolução temporal até 50000 passos de tempo.	40
Figura 16 – Estimativa numérica da dependência do acoplamento característico de IM com o tamanho da cadeia, para letra a) $\zeta = 0.5$, b) $\zeta = 1.0$, c) $\zeta = 1.5$ e d) $\zeta = 2$	42
Figura 17 – Mínimos da função participação para valores do grau de saturação da não linearidade (a) $\zeta = 0.00$, (b) $\zeta = 0.25$, (c) $\zeta = 0.50$ e (d) $\zeta = 0.75$	43
Figura 18 – Função Participação média. Para parâmetro $\chi = 0$ até 8 e grau de saturação $\zeta = 0$ até 1.	44

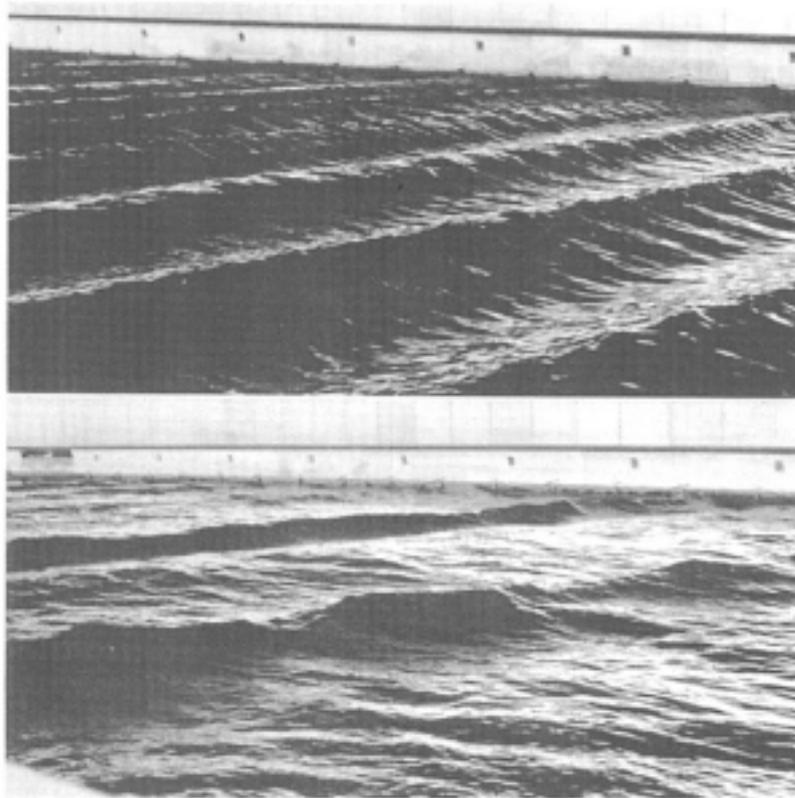
Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Modelo de Bloch	13
1.2	Não linearidade	16
1.3	Instabilidade Modulacional	17
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	21
2.1	Modelo de Holstein e Equação de Schrödinger Não Linear	21
2.2	Análise de Estabilidade linear	28
3	INSTABILIDADE MODULACIONAL COM NÃO LINEARIDADE SATURADA	34
3.1	Não Linearidade Saturada	34
3.2	Modelo	36
3.3	Resultados e Discussões	38
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	46
	REFERÊNCIAS	47
	APÊNDICES	55
	APÊNDICE A - Dedução do Teorema de Bloch	56
	APÊNDICE B - Dedução do χ_{IM} com saturação	58

1 Introdução

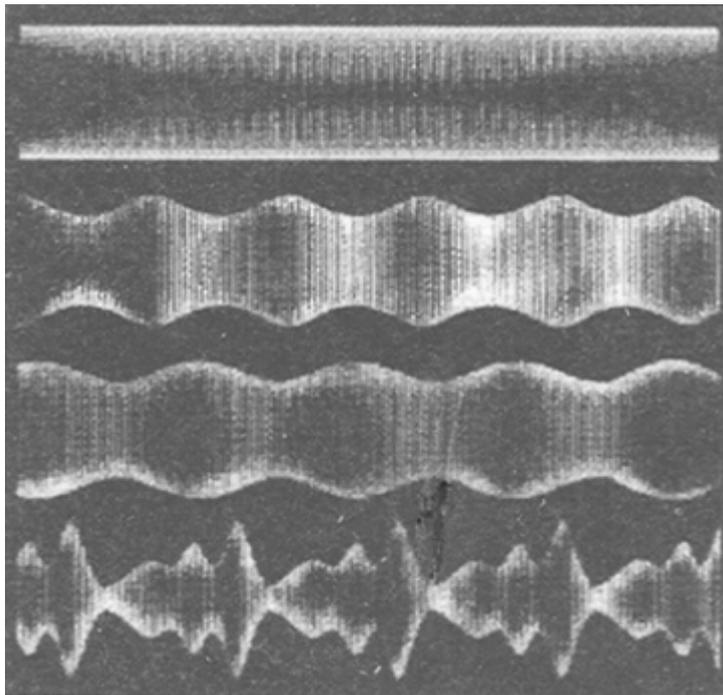
A instabilidade modulacional (IM) é um fenômeno caracterizado pela amplificação de uma pequena perturbação (ou ruído) que se encontra adicionado na amplitude da função de onda. Ocorre em sistemas ondulatórios e não lineares, onde efeitos dispersivos combinados ao meio não linear, pode causar IM.

Figura 1 – Evidencia experimental da IM em águas profundas. Profundidade de 7.6 *m* e comprimento de onda fundamental de 2.2 *m*



Fonte: Retirada da referência ([ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009](#)).

Inicialmente, a IM foi investigada nos anos 60, onde estudos independentes surgiram em hidrodinâmica e em óptica não linear, estes trouxeram resultados físicos e matemáticos muito semelhantes ([ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009](#)). Para ondas de água, Benjamin e Feir demonstraram experimentalmente e teoricamente a IM para ondas de Stokes ([ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009](#)). Para melhor visualização do fenômeno, vemos na figura 1 a fotografia de trens de ondas progressivas em duas estações, ilustrando a quebra da onda causada pela IM ([BENJAMIN et al., 1967; ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009](#)). Na parte de cima da figura, temos a vista perto do gerador de ondas e, a aproximadamente 60 *m* do gerador de ondas, a vista de longe.

Figura 2 – Instabilidade modulacional em ondas eletromagnéticas.

Fonte: Retirada da referência (ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009).

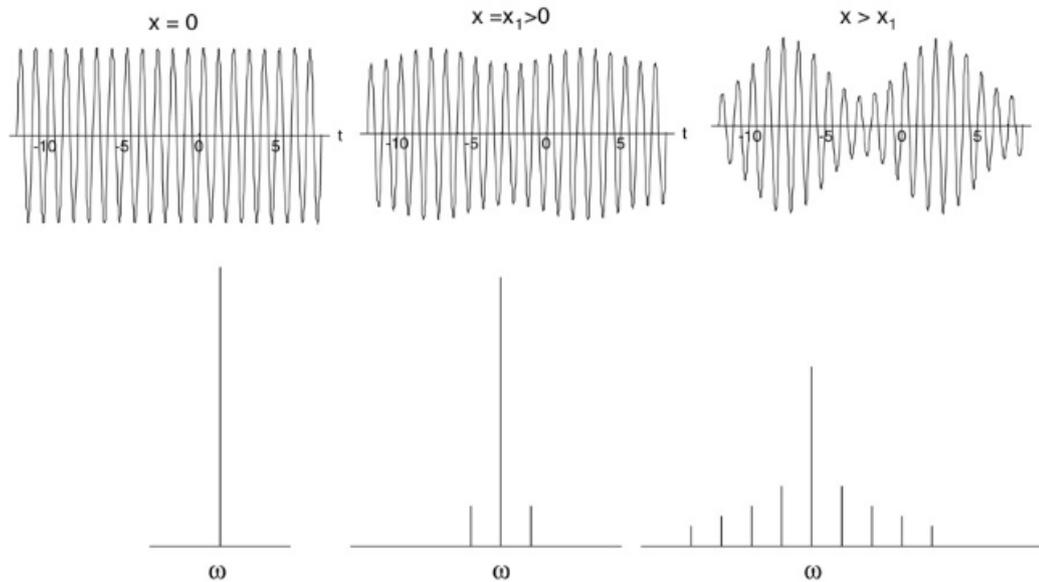
Para ondas eletromagnéticas, os autores Ostrovskii *et al* (OSTROVSKII; SOUSTOV, 1972) fizeram uma investigação em linhas de transmissão contendo diodos semicondutores, onde observaram a IM. Como podemos ver na figura 2, os oscilogramas, de cima para baixo, correspondem ao aumento da distância ao longo da linha. A primeira observação experimental foi feita pelos os autores Zagryadskaya e Ostrovskii (ZAGRYADSKAYA; OSTROVSKII, 1968), para uma faixa de valores de frequência (200 a 500 kHz), em uma linha com ferrites¹.

A instabilidade modulacional, ou instabilidade de banda lateral, ou ainda, instabilidade de modulação, isto é, a amplificação de pequena modulação inicial (ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009), pode ser observada também na figura 3. Na parte de cima da figura 3, temos a evolução da onda para um trem de ondas causado pela IM. Abaixo nos observamos a amplificação da frequência da pequena perturbação inicial.

Como foi dito, a IM pode ser observada em sistemas ondulatórios e não lineares, sendo que esses sistemas podem ser clássicos ou quânticos. Havendo as fenomenologias citadas, podemos ter IM. Para essa dissertação, iremos nos concentrar no contexto eletrônico, no qual iremos trazer novas contribuições sobre a temática. Primeiramente, devemos citar, os autores Chaves, Lima e Lyra (FILHO *et al.*, 2015), que investigaram em 2015 a IM em redes discretas não lineares unidimensionais e bidimensionais, em que mostraram que o parâmetro que regula a intensidade não linear (χ), possui uma relação com o tamanho da

¹ A forma mais pura de ferro, construída a partir de uma série de cristais da mesma composição, recebe o nome de ferrite (ou ferrita) (MARANIAN, 2010).

Figura 3 – Acima: Evolução de um trem de ondas não linear causado pela IM. Abaixo: A evolução do espectro da onda correspondente.



Fonte: Retirada da referência (ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009).

cadeia. Seguindo a linha de investigação desses autores, iremos ampliar a compreensão da IM para o sistema unidimensional, levando em conta um novo ingrediente.

Relativamente à nova consideração, citamos os autores Santos *et al* (SANTOS *et al.*, 2015). Nesse trabalho, também de 2015, eles propuseram um estudo em uma cadeia desordenada, onde seu sistema não linear possuía saturação. Mostraram que a saturação pode promover modos do tipo respirantes na dinâmica. A saturação atua como fator limitante na interação efetiva da função de onda com o sistema não linear e ainda é responsável por trazer novas conjunturas sobre a dinâmica. Diante disso, investigamos a IM em uma rede unidimensional cristalina, com condições periódicas de contorno e não linearidade saturada, no qual analisamos o papel da saturação sob a IM e quais novas fenomenologias estão presentes no sistema.

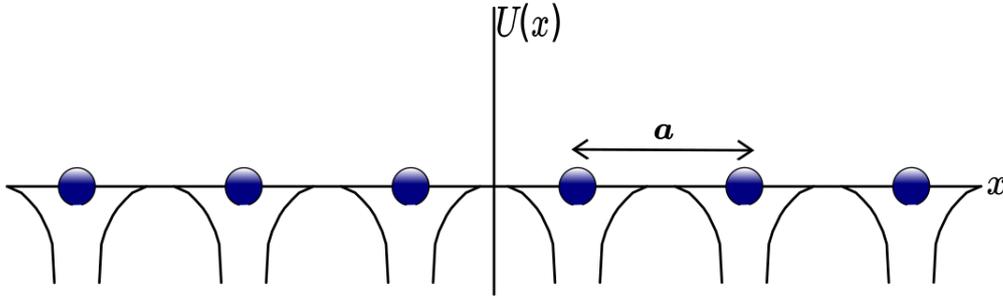
Com a finalidade de trazer melhor compreensão sobre esse primeiro capítulo, iremos iniciar nossas discussões abordando o modelo de Bloch. Como veremos, um dos principais resultados do modelo de Bloch, é o fato da função de onda se estender por toda a cadeia cristalina, dessa forma, garantindo nossa condição inicial. Em seguida, trazemos uma breve discussão sobre não linearidade e, logo após, voltaremos nossa atenção ao fenômeno de IM, onde destacaremos trabalhos teóricos e experimentais importantes para o tema.

1.1 Modelo de Bloch

Os estudos de certos sistemas em Física são, em geral, realizados utilizando modelos teóricos já existentes na literatura. Esses modelos foram construídos para tentar expli-

car/prever as propriedades de certos materiais, ou investigar fenômenos vistos na natureza. Para o contexto da física do estado sólido, encontramos modelos que explicam muito bem a dinâmica da função de onda de partículas, como a dos elétrons. Uma dessas descrições teóricas surgiu em meados dos anos 20, chamado de Modelo de Bloch (BLOCH, 1929). Formulado por Felix Bloch em sua tese de doutorado em 1928, apresentou um modelo puramente quântico, que tratava da condução de elétrons em cristais. Nesse modelo, ele considerou um sistema cristalino, onde os constituintes (íons, moléculas, átomos) são idênticos, espaçados de maneira igual e a interação entre os elétrons de condução pode ser desprezada (DIAS, 2011).

Figura 4 – Representação típica de um potencial periódico $U(x)$ para um sistema unidimensional. Todos os sítios são iguais, representados pelos pontos azuis e igualmente separados por uma distância a .



Fonte: Autor, 2021.

Desse modo, temos apenas a interação dos elétrons com os íons da rede, com a energia dessa interação sendo representada pelo potencial periódico

$$U(x) = U(x + a), \quad (1.1)$$

onde a é a distância entre os íons, representados pelas esferas de cor azul na figura 4. Vemos também a representação desse potencial periódico (a curva abaixo) em função da posição dos íons. Para um potencial mais geral, podemos escrever:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}), \quad (1.2)$$

em que $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ é um vetor típico da rede de Bravais (ASHCROFT; MERMIN, 1976), com \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 vetores primitivos e n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros.

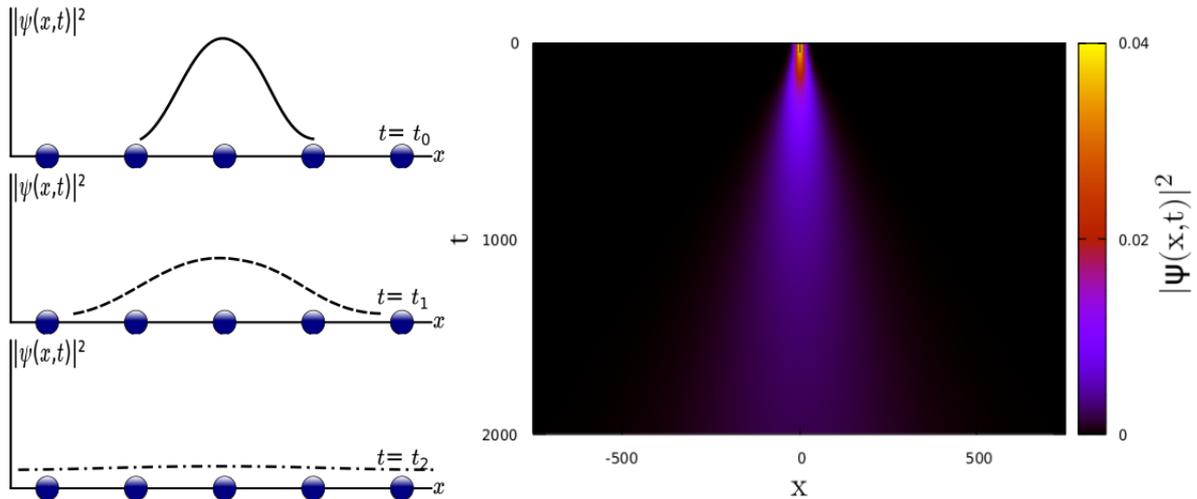
A equação de Schrödinger para esse potencial é dada por:

$$H\psi(\vec{r}, t) = E\psi(\vec{r}, t), \quad (1.3)$$

onde o hamiltoniano de Bloch é:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}). \quad (1.4)$$

Figura 5 – Do lado esquerdo: Representação da dispersão de um elétron em uma rede cristalina linear e unidimensional. Do lado direito: Simulação com tamanho de cadeia $x = 1000$ e evoluindo até $t = 2000$ passos. $|\psi(x, t)|^2$ é a amplitude de probabilidade de encontrarmos o elétron em uma região x da cadeia. No instante $t = 0$ temos o elétron com amplitude máxima e de acordo que o tempo t passa, a amplitude diminui até o elétron estar completamente espalhado pela cadeia.



Fonte: Autor, 2021.

Bloch mostrou que as soluções para a equação (1.3) com o hamiltoniano acima, é dada por:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (1.5)$$

no qual $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função de Bloch da equação de onda que é invariante sob translação, ou seja, possui a periodicidade da rede cristalina $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$. Além disso, o índice k indica que a função de onda depende do vetor de onda \vec{k} , com k na primeira zona de Brillouin e um n associado. Para cada n , conhecido como índice da banda, a um conjunto de níveis eletrônicos $E_n(\vec{k})$, que chamamos de banda de energia (1.3). A equação (1.5) é conhecida na literatura como teorema de Bloch (ver apêndice A).

Nesse modelo², com as considerações propostas por Bloch, foi possível mostrar que a função de onda do elétron se estende por toda a rede de modo que a probabilidade de encontrarmos o elétron em qualquer parte do sistema é a mesma quando realizamos uma medição. Um elétron colocado em um cristal é ilustrado na figura 5, mostrando a função de onda se espalhando por toda a cadeia. A evolução temporal vista na figura 5, pode ser feita fazendo uso da equação de Schrödinger dependente do tempo, dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t), \quad (1.6)$$

² Para mais detalhes sobre esse e outros modelos, consulte as referências (DIAS, 2011; ASHCROFT; MERMIN, 1976).

sendo esta uma equação diferencial linear (ARFKEN; HARRIS, 2013).

Além do modelo de Bloch, existem outros modelos de condução eletrônica na literatura. Para sistemas desordenados encontramos o modelo de Anderson (ANDERSON, 1958), que considera imperfeições na rede cristalina, podendo ser do tipo composicional (DIAS, 2011; ANDERSON, 1958) ou estrutural (COÊLHO; DIAS, 2020). Temos também o modelo de Hubbard (HUBBARD; FLOWERS, 1963; HUBBARD; FLOWERS, 1964a; HUBBARD; FLOWERS, 1964b), que considera a interação entre os elétrons, lavando em conta um custo energético local quando dois elétrons ocupam o mesmo sítio (DIAS, 2011). Outro modelo de destaque é o de Holstein (HOLSTEIN, 1959a; HOLSTEIN, 1959b). Neste modelo ele propôs a descrição da formação de polarons em um cristal molecular unidimensional, onde os sítios da cadeia são moléculas diatômicas que possuem um pequeno movimento oscilatório, dando origem um termo não linear na equação de Schrödinger. Desordem, interação eletrônica, não linearidade, dentre outros fatores, são discutidos em várias áreas de estudo. Em particular, é do nosso interesse a não linearidade, sendo este o nosso foco inicial.

1.2 Não linearidade

A não linearidade é um tópico de grande relevância para física e surge em diversas áreas de estudo. Em física do estado sólido a investigação das fenomenologias oriundas de sistemas eletrônicos não lineares é possível quando construímos a equação de Schrödinger não linear (ESNL) efetiva para o problema. Para uma não linearidade do tipo *Kerr*, ou seja, uma linearidade cúbica (BOYD, 2008; FILHO, 2015), a ESNL pode ser escrita, feitas as considerações adequadas, como:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - \chi |\psi(\vec{r}, t)|^2 \psi(\vec{r}, t), \quad (1.7)$$

onde o último termo da equação acima é o termo não linear da ESNL, sendo χ a intensidade não linear³ e ψ a função de onda.

Para tanto, o termo não linear na equação de Schrödinger surge quando consideramos que os constituintes da rede possuem um pequeno movimento oscilatório em torno do seu ponto de equilíbrio, de modo que precisamos levar em conta os modos vibracionais da rede (fônon). A função de onda do elétron quando interagente com esses modos de vibração da rede, dá origem a um tipo de interação conhecida na literatura como interação elétron-fônon (DIAS, 2011).

Estudar sistemas não lineares, em geral, é muito complicado no âmbito analítico. Podendo as vezes nem haver soluções, como nos sistemas caóticos (THORNTON; MARION, 2004). Dessa forma, com o aprimoramento dos computadores e dos métodos numéricos, as simulações em sistemas não lineares foram ampliadas consideravelmente (FILHO, 2015).

³ χ é o parâmetro que fornece o grau de interação elétron-fônon no modelo de Holstein.

Uma das primeiras simulações em sistemas não lineares foi feita por Fermi, Pasta e Ulam (1955) em Los Alamos (FERMI et al., 1955). Para um sistema unidimensional com 64 partículas de massa m e forças entre os vizinhos contendo termos não lineares, os autores investigaram a propagação da energia vibracional nessa cadeia. Hoje em dia, existem diversos métodos numéricos para resolução desses problemas não lineares. Para esta dissertação, investigamos os fenômenos não lineares usando o método numérico de Runge-Kutta (VALLE, 2012; PRESS SAUL A. TEUKOLSKY; FLANNERY, 1992; COOPER; VERNER, 1972).

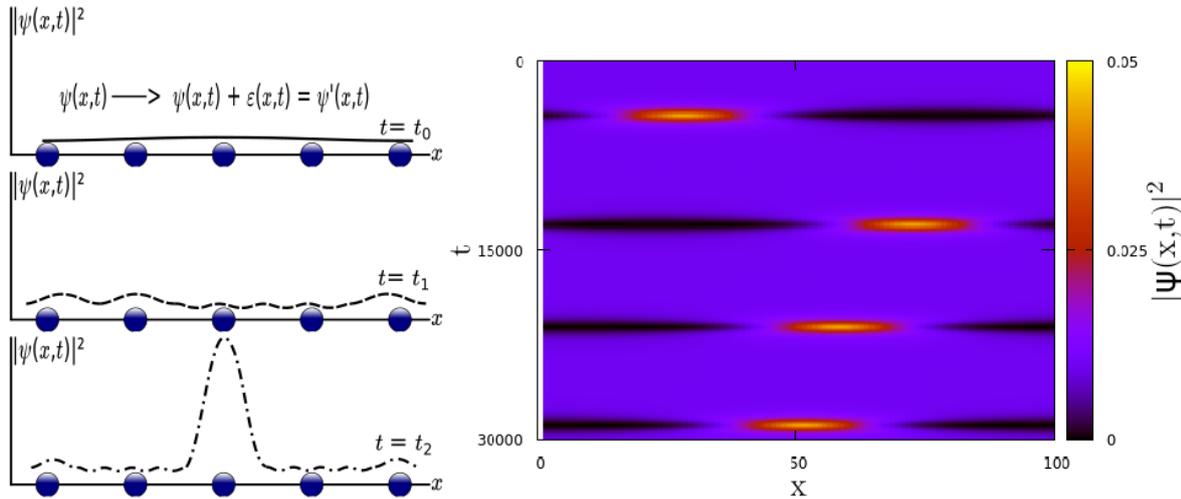
As fenomenologias oriundas de sistemas não lineares, podem surgir quando combinamos as contribuições de efeitos não lineares e dispersivos. Assim, é possível investigarmos fenômenos como o da instabilidade modulacional (IM) (KIVSHAR; PEYRARD, 1992; ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009; WANG et al., 2017; FILHO et al., 2015; BHAT et al., 2021), respirações periódicas (*breathers*) (FLACH; GORBACH, 2008), respirações aleatórias (*chaotic-like*) (FILHO et al., 2015), o surgimento de sólitons (HASEGAWA, 2002; KARTASHOV et al., 2011; GAUL et al., 2011), auto-armadilhamento (*self-trapping*) (FILHO et al., 2015; KENKRE; CAMPBELL, 1986; JOHANSSON et al., 1995; PAN et al., 1997; SANTOS et al., 2015), dentre outros. Além do contexto eletrônico, podemos nos deparar com esses fenômenos não lineares em óptica (ANKER et al., 2005; BOYD, 2008; AKHMEDIEV et al., 2009), condensados de Bose-Einstein (CBE) (PITAEVSKII, 1961; GROSS, 1963; LEGGETT, 2001; EVERITT et al., 2017), física de plasma (TANIUTI; WASHIMI, 1968; HASEGAWA, 1975; SHIVAMOGGI, 1985), etc.

1.3 Instabilidade Modulacional

Destes fenômenos, o de nosso maior interesse é o da IM, que ocorre em meios não lineares com efeitos dispersivos. A IM caracterizada pela amplificação de uma pequena perturbação (ruído), que é adicionada na amplitude da função de onda, como representada na figura 6. Essa fenomenologia é amplamente investigada na literatura e é usualmente vista como uma etapa primária para a formação dos *solitons* (FILHO, 2015), fenômeno muito relevante em aplicações tecnológicas (MALUCKOV et al., 2008; AMIRI MZ ZULKIFLI, 2014; AMIRI et al., 2015a; AMIRI et al., 2015b).

Tratando-se do contexto histórico, Zakharov e Ostrovsky em 2009 (ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009) apresentaram um panorama inicial dos estudos acerca dessa fenomenologia. Por volta de 1960, os primeiros trabalhos sobre IM foram investigados de forma quase independente em hidrodinâmica clássica e óptica não linear, por ocidentais e soviéticos, respectivamente. Tais estudos conduzem essencialmente aos mesmos resultados matemáticos e físicos. A variedade de trabalhos que surgiram no pouco espaço de tempo, indica a importância da IM em muitas áreas da física (ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009). Em águas profundas, Benjamin e Feir (BENJAMIN; FEIR, 1967) observaram o

Figura 6 – Do lado esquerdo: Representação da IM. Adicionamos um pequeno ruído, $\epsilon(x, t)$, no início da dinâmica, $t = t_0$, e a medida que o tempo passa, a dinâmica ocorre e temos a ocorrência da IM. Do lado direito: Simulação com tamanho de cadeia $x = 100$ e parâmetro $\chi = 0.280$.



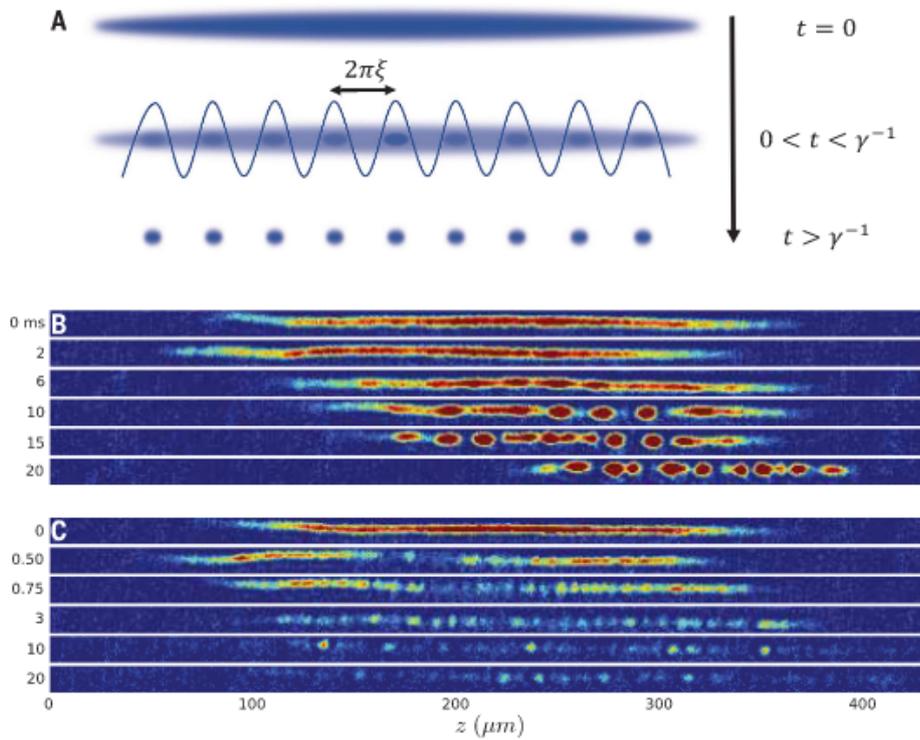
Fonte: Autor, 2021.

fenômeno de IM, onde mostraram que ondas progressivas de amplitude finita são instáveis. Bespalov e Talanov em 1966 (BESPALOV; TALANOV, 1966) também previram a IM em um estudo da propagação de feixes de luz em líquidos não lineares e, em 1986, Tai, Hasegawa e Tomita (TAI et al., 1986) observaram em fibras ópticas não lineares.

Além dos estudos sobre IM mencionados acima, encontramos também em outros cenários da física. Em 2003, Salasnich *et al* (SALASNICH et al., 2003) apresentaram estudos sobre IM em CBE. Mostraram o processo dinâmico da formação de trens de *solitons*, induzido pela IM, onde derivaram uma fórmula para o número de *solitons*. Em 2017 Nguyen e colaboradores (NGUYEN et al., 2017) relatam um estudo teórico e experimental em CBE para a formação de trens de *solitons*, como visto na figura 7, onde mostraram que a IM é crucial nesse processo. Examinaram também uma lei de escala dentro do sistema que fornece uma estimativa sobre o número de sólitons formados pela IM. Ainda no contexto de condensados, Everitt *et al* (EVERITT et al., 2017) apresentaram um estudo da IM e na sua relevância na formação de *solitons*. Nesse trabalho, os autores relataram a quebra do CBE em componentes espacialmente localizadas, sendo do tipo sólitons e estáveis, propagando por mais de 90ms (SOUSA, 2015).

Marquié, Bilbault e Remoissenet em 1995 (MARQUIÉ et al., 1995b) fizeram um estudo teórico e experimental do intervalo onde ocorre IM em redes elétricas não lineares (figura 8). Posteriormente, os mesmos autores (MARQUIÉ et al., 1995a) relataram que em razão da IM, ocorre a formação de sólitons em redes elétricas. Em 2015 os autores Chaves, Lima e Lyra (FILHO et al., 2015) investigaram a IM e o auto-armadilhamento em redes discretas

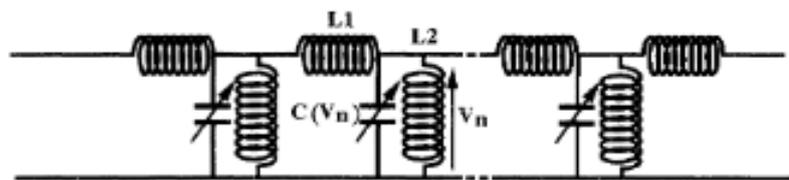
Figura 7 – Formação do trem de *soliton* a partir da IM. Figura A: Representação esquemática do fenômeno. IM resulta em um crescimento da pequena perturbação em uma escala de tempo $2\pi\xi$. Figura B: Formação do *soliton* para um parâmetro de espalhamento $a_f = -0.18a_0$ (onde a_0 é o raio de Bohr) e um tempo de espera (t_h) de $t_h = 0ms$ a $t_h = 20ms$. Cada imagem (de cima para baixo) corresponde a um diferente experimento. Figura C: Similar a figura B, contudo o parâmetro de espalhamento é $a_f = -2.5a_0$.



Fonte: Retirada da referência (NGUYEN et al., 2017)

não lineares. Eles mostraram que o parâmetro de acoplamento não linear (χ) crítico acima do qual ocorre IM, permanece finito para redes quadradas e decai proporcionalmente com $1/L$ para cadeias lineares. Além disso, mostraram que há uma transição direta do regime

Figura 8 – Representação do experimento em linhas de transmissão. A rede é composta por 80 células idênticas, com dois indutores L_1 e L_2 . A capacitância não linear $C(V_n)$ consiste em um diodo varicap (ou varactor) BB112, polarizado com uma tensão constante de $2V$ e conectado em paralelo com uma capacitância linear de $C_1 = 150 pF$.



Fonte: Retirada da referência (MARQUIÉ et al., 1995b)

onde a função de onda é uniformemente estável para o auto-armadilhamento. Contudo, para sistemas unidimensionais, existe um regime intermediário onde ocorrem respirações complexas (FILHO *et al.*, 2015).

Como mencionado anteriormente, iremos investigar um sistema unidimensional cristalino, com condições periódicas de contorno e não linearidade saturada. Destacamos os trabalhos dos autores Chaves *et al* (FILHO *et al.*, 2015) e dos autores Santos *et al* (SANTOS *et al.*, 2015), sendo estes trabalhos motivadores. Usando o modelo de Holstein para tratar o sistema, dispomos o elétron totalmente estendido pela cadeia e adicionamos uma pequena perturbação apenas no instante $t = t_0$, de modo a avaliar a dinâmica do ruído durante a evolução temporal e, assim, investigar a IM. Além disso, escolhendo um conjunto de valores de intensidade de saturação (ζ), investigamos como a não linearidade saturada influencia na IM. Ao longo do texto, traremos mais detalhes sobre o nosso trabalho. Dessa forma, nos dividimos o trabalho como segue.

No segundo capítulo, temos a fundamentação teórica. Estabelecemos as principais ferramentas analíticas para determinarmos a equação de Schrödinger não linear discreta (ESNLD) efetiva, para o modelo de Holstein e aproximação adiabática. Em seguida, apresentamos a instabilidade modulacional (IM) e fizemos uma análise de estabilidade linear, onde encontramos uma relação de dispersão que nos permitirá deduzir analiticamente um χ crítico de IM.

No capítulo 3, apresentamos a não linearidade saturada. Em seguida apresentamos o nosso modelo. Mostramos a ESNLD para o nosso problema e algumas reproduções da literatura para o caso $\zeta = 0$, para validarmos o nosso código computacional. Finalmente, os nossos resultados são expostos e qual o efeito da saturação na IM e no auto-armadilhamento (*self-trapping*). Por fim, no capítulo 4, apresentamos nossas conclusões e perspectivas futuras.

2 Fundamentação Teórica

Nesse capítulo apresentamos a equação de Schrödinger não linear (ESNL) e a instabilidade modulacional (IM). Na primeira parte, demonstramos a ESNLD no contexto eletrônico usando o modelo de Holstein (HOLSTEIN, 1959a; HOLSTEIN, 1959b) para um sistema unidimensional e cristalino. O tipo de interação utilizada no modelo surge quando consideramos que os sítios da cadeia, possuem um pequeno grau vibracional, dando origem à modos de vibração (ou fônons¹), que interagem com os elétrons na cadeia, responsável pelo o termo não linear na ESNL.

Em seguida, apresentamos a IM. É fenômeno não linear que ocorre quando um pequeno ruído é amplificado. Este ruído é adicionado na amplitude de uma onda e quando os efeitos não lineares são combinados com os dispersivos, podemos observar esse fenômeno (SOUSA, 2015). Usando o método de análise de estabilidade, conforme encontramos na literatura (FILHO et al., 2015), Calculamos analiticamente o parâmetro que nos fornece o grau de interação elétron-fônon (χ) crítico efetivo, para alcançarmos o regime de IM.

2.1 Modelo de Holstein e Equação de Schrödinger Não Linear

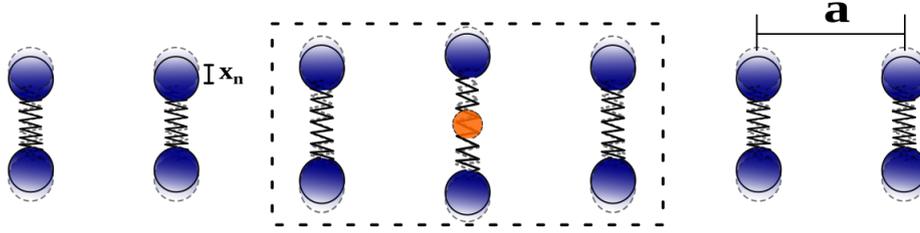
A equação de Schrödinger é amplamente utilizada para a descrição de diversos problemas em física. Particularmente, quando levamos em conta determinadas condições, podemos encontrar uma equação de Schrödinger não linear (ESNL) efetiva para certos problemas. Assim, descrevemos a dinâmica de ondas em meios não lineares, podendo assim investigar várias fenomenologias oriundas desses problemas. Como já mencionado, a instabilidade modulacional (IM) e o auto-aprisionamento (*self-trapping*) são fenômenos não lineares que podemos estudar com a ESNL. Encontramos na literatura para a óptica não linear (BOYD, 2008; HASEGAWA; TAPPERT, 1973), condensados de Bose-Einstein (CBE) (PITAEVSKII, 1961; GROSS, 1963), transporte eletrônico (FILHO et al., 2015; SANTOS et al., 2015), vários estudos sobre essas temáticas.

Para esta dissertação, nos concentramos no contexto eletrônico, de modo que determinamos a ESNLD, usando o modelo de Holstein. Holstein foi pioneiro nos estudos da ESNL (DIAS, 2011). Ele propôs em seu modelo a descrição da formação de polarons² em um cristal molecular unidimensional, ilustrado na figura 9, onde os sítios da cadeia são moléculas diatômicas que possuem um pequeno grau de liberdade vibracional (HOLS-

¹ A energia de vibração da rede é quantizada. Um quantum de energia de vibração da rede denomina-se fônon (KITTEL, 1978; Simon, 2013).

² Um efeito sutil da interação elétron-fônon é dado pelo crescimento aparente da massa do elétron em metais e isolantes provocado pelo fato de o elétron arrastar o núcleo iônico pesado em seu movimento (KITTEL, 1978). A partícula composta pelo elétron mais o campo do fônon é chamada de polaron (KITTEL, 1987).

Figura 9 – Representação de uma cadeia de Holstein. Molécula diatômica formada por dois sítios (círculos azuis), ligados por uma mola. Elétron (círculo laranja) ao passar pela cadeia interage com a molécula diatômica formando o polaron. A distância entre moléculas é dado por \mathbf{a} e a separação internuclear x_j .



Fonte: Autor, 2021.

TEIN, 1959a). Quando levamos em conta esse grau de liberdade vibracional, conseguimos demonstrar ESNLD de nosso interesse.

O Hamiltoniano para nosso sistema, dentro da aproximação *tight-binding*³, é dado pela expressão:

$$\hat{H} = \hat{H}_r + \hat{H}_e + \hat{H}_{e-r}, \quad (2.1)$$

onde cada termo do lado direito é, respectivamente, o hamiltoniano da rede, o hamiltoniano referente as energias dos elétrons e o hamiltoniano da interação elétron-rede.

O primeiro termo da equação (2.1) é o referente a rede unidimensional. Podemos considerá-lo como sendo dado pela soma da energias cinéticas e potencial dos constituintes da rede (HOLSTEIN, 1959a), onde os modos de vibração são descritos como osciladores harmônicos. Então \hat{H}_r é dado por:

$$\hat{H}_r = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{P}_j^2}{2M} + \frac{M\omega^2 \hat{X}_j^2}{2}, \quad (2.2)$$

com $\hat{P}_j (= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{X}_j})$ o operador momentum associado ao grau de liberdade vibracional na j -ésima molécula do cristal, cuja a separação internuclear típica da posição de equilíbrio é x_j . \hat{X}_j é o operador posição relacionado com esse grau de liberdade vibracional, ω é a frequência dos osciladores e M a massa efetiva.

Para a equação (2.2), levaremos em consideração que a energia cinética da rede [primeiro termo de (2.2)] é aproximadamente nula, isso porque a dinâmica da rede, frente a dinâmica do elétron, ocorre muito mais devagar⁴, de modo que podemos tomar $\hat{P}_j \simeq 0$. Portanto o

³ Essa aproximação nos diz que há um *overlap* pequeno entre os orbitais atômicos, de modo que teremos transição eletrônica apenas para os primeiros vizinhos da cadeia.

⁴ A velocidade típica do elétron é da ordem de $v_e \simeq 10^8$ cm/s, enquanto a velocidade típica dos íons é da ordem de $v_f \simeq 10^5$ cm/s (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

primeiro termo da equação (2.2) pode ser desprezado, ficando apenas com a contribuição da energia potencial

$$\hat{H}_r \simeq \sum_{j=1}^N \frac{M\omega^2 \hat{X}_j^2}{2}. \quad (2.3)$$

A aproximação feita acima é conhecida na literatura como *Aproximação Adiabática*⁵. Essa aproximação é capaz de resgatar as fenomenologias essenciais na dinâmica do elétron, quando este interage com as vibrações discretas da rede (JOHANSSON et al., 1995; PAN et al., 1997; DATTA; KUNDU, 1996).

Para o segundo termo da equação (2.1), temos o hamiltoniano referente às energias do elétron. Para o hamiltoniano H_e , temos a seguinte expressão:

$$H_e = \sum_{j=1}^N \epsilon_j c_j^\dagger c_j + J(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j), \quad (2.4)$$

onde ϵ_j é o termo de energia local (*onsite*) do sítio j , J é o termo de energia cinética (ou *hopping*) para saltar para os primeiros vizinhos e os termos c_j e c_j^\dagger são os operadores aniquilação e criação do elétron, respectivamente no j -ésimo sítio. Para a equação acima, vamos tomar o referencial de energia como sendo nulo, dessa forma, como a rede é cristalina e todos os sítios são idênticos, $\epsilon_j = 0$ (DIAS, 2011). Dessa forma (2.4) fica da forma:

$$H_e = J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j). \quad (2.5)$$

Finalmente, o último termo da equação (2.1), H_{e-r} , representa a energia proveniente da interação dos modos de vibração da rede (fônons) com os elétrons e é da forma:

$$H_{e-r} = A \sum_{j=1}^N \hat{X}_j c_j^\dagger c_j, \quad (2.6)$$

no qual A representa o termo de acoplamento elétron-fônon com as vibrações da rede no sítio j .

Dispondo das equações (2.3), (2.5) e (2.6) e substituindo em (2.1), obtemos o hamiltoniano para um sistema unidimensional com modos de vibrações (fônons) e interação elétron-fônon:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{M\omega^2 \hat{X}_j^2}{2} + J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + A \sum_{j=1}^N \hat{X}_j c_j^\dagger c_j. \quad (2.7)$$

Para obtermos a equação de Schrödinger efetiva para o nosso problema, vamos analisar o hamiltoniano acima tendo em vista que a função de onda de um dado estado (ψ) pode

⁵ Existe diferenças entre as massas e as velocidades dos elétrons com os sítios da rede, de modo que, como os elétrons são muito mais rápidos, é levado em conta que suas distribuições se adaptam quase que instantaneamente com as configurações dos sítios. Portanto são mantidos parados os sítios da rede na solução do problema eletrônico (DINIZ, 2014; AMARAL, 2019). Por isso $\hat{P}_j \simeq 0$.

ser representada por uma superposição de funções de onda locais (ϕ) (HOLSTEIN, 1959a), de modo que:

$$\psi(\mathbf{r}, x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^N a_j(x_1, \dots, x_N) \phi_j(\mathbf{r} - j\mathbf{a}, x_j), \quad (2.8)$$

onde os a_j são as amplitudes de probabilidade em cada sítio, j , que depende de todas as coordenadas internucleares $\{x_n\}$, ϕ_j são as funções de onda de cada sítio e \mathbf{a} é o vetor da rede de Bravais.

Possuindo as equações (2.7) e (2.8), tendo em vista que estamos considerando a aproximação adiabática, podemos minimizar as energias potenciais vibracional e eletrônica (HOLSTEIN, 1959a), de modo a obter o valor médio de H , definido como:

$$\langle H \rangle = \int \psi^* H \psi d\mathbf{r}, \quad (2.9)$$

onde ψ^* ($= \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^*$) é o complexo conjugado de ψ ($= \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$). Temos então que:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = \int \left\{ \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[\frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N \hat{X}_j^2 + J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) \right. \right. \\ \left. \left. + A \sum_{j=1}^N \hat{X}_j c_j^\dagger c_j \right] \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \right\} d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

distribuindo os ψ 's:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = \int \left\{ \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[\frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N \hat{X}_j^2 \right] \sum_{i=1}^N a_i \phi_i + \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) \right] \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[A \sum_{j=1}^N \hat{X}_j c_j^\dagger c_j \right] \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \right\} d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

temos ainda:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = \int \left\{ \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[\frac{M\omega^2}{2} \sum_{i,j=1}^N a_i \hat{X}_j^2 \phi_i \right] + \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[J \sum_{i,j=1}^N a_i (c_j^\dagger c_{j+1} \phi_i + c_{j+1}^\dagger c_j \phi_i) \right] \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[A \sum_{i,j=1}^N a_i \hat{X}_j c_j^\dagger c_j \phi_i \right] \right\} d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

com $\hat{X}_j\phi_i = x_j\phi_i$ e aplicando os operadores aniquilação e criação em ϕ_i ⁶, ficamos com:

$$\langle H \rangle = \int \left\{ \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[\frac{M\omega^2}{2} \sum_{i,j=1}^N a_i x_j^2 \phi_i \right] + \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[J \sum_{i=1}^N a_i (\phi_{i-1} + \phi_{i+1}) \right] + \sum_{m=1}^N a_m^* \phi_m^* \left[A \sum_{i=1}^N a_i x_i \phi_i \right] \right\} d\mathbf{r}, \quad (2.13)$$

distribuindo as integrais e reorganizando a equação (2.13):

$$\langle H \rangle = \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 \sum_{m,i=1}^N a_m^* a_i \int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} + J \sum_{m,i=1}^N a_m^* (a_{i+1} + a_{i-1}) \int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} + A \sum_{m,i=1}^N a_m^* a_i x_i \int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r}. \quad (2.14)$$

Considerando que as sobreposições das funções de onda (*overlap*) são nulas e que as autofunções são ortonormais, temos:

$$\int \phi_m^* \phi_i d\mathbf{r} = \delta_{m,i}, \quad (2.15)$$

e ainda:

$$\int \psi_m^* \psi_i d\mathbf{r} = 1 \longrightarrow \sum_i |a_i|^2 = 1, \quad (2.16)$$

de modo que a equação (2.14) fica da forma:

$$\langle H \rangle = \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 + \sum_{i=1}^N [J a_i^* (a_{i+1} + a_{i-1}) + A |a_i|^2 x_i]. \quad (2.17)$$

Dispondo da equação acima, resolvemos $\langle H \rangle$ sobre um conjunto de $\{x_i\}$ que a minimizam. Para isso, devemos diferenciar (2.17) com relação a um x_p , de modo que ficamos

⁶ Note que: $\sum_{i,j} a_i c_j^\dagger \underbrace{c_{j+1} \phi_i}_{j+1=i} \Rightarrow j = i - 1 \Rightarrow \sum_i a_i c_{i-1}^\dagger \phi_i = \sum_i a_i \phi_{i-1}$, fazendo $i \rightarrow i + 1$ temos:

$\sum_{i,j} a_i c_j^\dagger c_{j+1} \phi_i = \sum_i a_{i+1} \phi_i$. Para $\sum_{i,j} a_i c_{j+1}^\dagger c_j \phi_i$ o cálculo é análogo. Podemos fazer isto, em princípio, porque usamos uma condição periódica de contorno.

com:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_p} &= \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial x_j^2}{\partial x_p} + \sum_i^N \left[J \frac{\partial (a_i^* (a_{i+1} + a_{i-1}))}{\partial x_p} + A \frac{\partial (x_i |a_i|^2)}{\partial x_p} \right] \\
&= M\omega^2 x_p + A |a_p|^2 + \sum_i^N \left[J \frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} (a_{i+1} + a_{i-1}) + J a_i^* \frac{\partial (a_{i+1} + a_{i-1})}{\partial x_p} + \right. \\
&\quad \left. + A x_i \frac{\partial (a_i a_i^*)}{\partial x_p} \right] \tag{2.18} \\
&= M\omega^2 x_p + A |a_p|^2 + \sum_i^N \left[J \frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} (a_{i+1} + a_{i-1}) + J a_i^* \frac{\partial a_{i+1}}{\partial x_p} + J a_i^* \frac{\partial a_{i-1}}{\partial x_p} + \right. \\
&\quad \left. + A x_i \frac{\partial (a_i)}{\partial x_p} a_i^* + A x_i a_i \frac{\partial (a_i^*)}{\partial x_p} \right],
\end{aligned}$$

organizando os termos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_p} &= M\omega^2 x_p + A |a_p|^2 + \sum_i^N \left[J \frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} (a_{i+1} + a_{i-1}) + A x_i a_i \frac{\partial (a_i^*)}{\partial x_p} \right] \\
&\quad + \sum_i^N \left[J a_i^* \frac{\partial a_{i+1}}{\partial x_p} + J a_i^* \frac{\partial a_{i-1}}{\partial x_p} + A x_i \frac{\partial (a_i)}{\partial x_p} a_i^* \right]. \tag{2.19}
\end{aligned}$$

Agrupando os termos e usando os multiplicadores de lagrange⁷, ficamos imediatamente com:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_p} &= M\omega^2 x_p + A |a_p|^2 + \sum_i^N \frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} [J(a_{i+1} + a_{i-1}) + A x_i a_i - \lambda a_i] \\
&\quad + \sum_i^N \frac{\partial a_i}{\partial x_p} [J(a_{i+1}^* + a_{i-1}^*) + A x_i a_i^* - \lambda a_i^*]. \tag{2.20}
\end{aligned}$$

Usando a equação de Schrödinger independente do tempo, dada por:

$$H\psi = E\psi, \tag{2.21}$$

obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
E a_i &= \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 a_i + J(a_{i+1} + a_{i-1}) + A x_i a_i \Rightarrow \\
\Rightarrow \left(E - \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 \right) a_i &= J(a_{i+1} + a_{i-1}) + A x_i a_i, \tag{2.22}
\end{aligned}$$

⁷ Para mais detalhes o leitor pode olhar o livro do Arfken, capítulo 22, seção 3 ([ARFKEN; HARRIS, 2013](#)).

e ainda:

$$\left(E - \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 \right) a_i^* = J(a_{i+1}^* + a_{i-1}^*) + Ax_i a_i^*. \quad (2.23)$$

Substituindo as duas equações acima em (2.20):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_p} &= M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 \\ &+ \sum_i^N \frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} \left(E - \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \lambda \right) a_i \\ &+ \sum_i^N \frac{\partial a_i}{\partial x_p} \left(E - \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \lambda \right) a_i^* \\ &= M\omega^2 x_p + A|a_p|^2 + \left(E - \frac{M\omega^2}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \lambda \right) \sum_i^N \underbrace{\left[\frac{\partial a_i^*}{\partial x_p} a_i + a_i^* \frac{\partial a_i}{\partial x_p} \right]}_{=0}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

pois $\frac{\partial}{\partial x_p} |a_i|^2 = \frac{\partial}{\partial x_p} 1 = 0$. Assim:

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A|a_p|^2, \quad (2.25)$$

onde, como queremos minimizar $\langle H \rangle$, temos que $\frac{\partial}{\partial x_p} \langle H \rangle = 0$, logo:

$$x_p = -\frac{A|a_p|^2}{M\omega^2}. \quad (2.26)$$

Portanto, substituindo (2.26) em (2.17), $\langle H \rangle_{min}$ é da forma:

$$\langle H \rangle_{min} = \sum_{i=1}^N \frac{M\omega^2}{2} \left[x_i^2 \Big|_{x_i = -\frac{A|a_i|^2}{M\omega^2}} + Ja_i^*(a_{i+1} + a_{i-1}) + A|a_i|^2 x_i \Big|_{x_i = -\frac{A|a_i|^2}{M\omega^2}} \right], \quad (2.27)$$

chegamos imediatamente no hamiltoniano final:

$$\langle H \rangle_{min} = \sum_{i=1}^N \left[Ja_i^*(a_{i+1} + a_{i-1}) - \frac{A^2}{2M\omega^2} |a_i|^4 \right]. \quad (2.28)$$

Finalmente, fazendo uso das relações canônicas:

$$i\hbar \frac{da_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial a_i^*} \langle H \rangle \quad (2.29)$$

e

$$i\hbar \frac{da_i^*}{dt} = \frac{\partial}{\partial a_i} \langle H \rangle, \quad (2.30)$$

encontramos a equação de Schrödinger não linear discreta⁸:

$$i\hbar \frac{da_i}{dt} = J(a_{i+1} + a_{i-1}) - \chi |a_i|^2 a_i, \quad (2.31)$$

onde $\chi = \frac{A^2}{M\omega^2}$ é o parâmetro que fornece o grau de interação efetiva do acoplamento elétron-fônon.

Derivada a equação de Schrödinger não linear (ESNL) na sua forma discreta (ESNLD)⁹, podemos investigar a dinâmica e as fenomenologias associadas ao nosso sistema. Equações análogas a esta podem ser encontradas na literatura em outros contextos (BOYD, 2008; PITAEVSKII, 1961; GROSS, 1963; HASEGAWA, 1975; SHIVAMOGGI, 1985).

Agora nos atemos à instabilidade modulacional (IM). Na seção subsequente deste capítulo, apresentamos a IM e a descrevemos em detalhes. Também analisamos analiticamente o parâmetro χ , visto na equação (2.31), que nos permite avaliar quando que o nosso sistema entrará no regime de IM. Feito isto apresentamos o nosso modelo e os nossos resultados.

2.2 Análise de Estabilidade linear

A instabilidade modulacional (IM) é um fenômeno que surge inerentemente em meios não lineares. É provocado pela ação combinada de efeitos dispersivos e não lineares e ocorre quando adicionamos uma pequena perturbação (ruído) na amplitude da função de onda e esse é amplificado, ou ainda, a quebra de uma onda contínua (CW¹⁰) em razão dessa amplificação. Após entrar nesse regime, o sistema evolui para oscilações regulares de batimentos (*breathers*) e podendo até resultar na formação de ondas solitárias (*solitons*¹¹).

A figura 10 ilustra as transições que podem ocorrer entre os regimes. Nessa simulação, evoluímos o sistema até o tempo $t = 50000$ passos, com uma discretização $dt = 10^{-2}$ e para valores de $\chi = 0.195, 0.200, 0.220, 1.500$ e 4.500 . Em (a) temos uma solução de onda contínua estável por toda a dinâmica, em (b), por outro lado, a pequena perturbação $\epsilon(x, t)$, para χ suficiente, os efeitos não lineares e dispersivos se combinam e ocorre a IM, culminando, assim, nos batimentos [(c)]. Em seguida temos uma dinâmica de oscilações irregulares do tipo caótica (*chaotic-like*) (KIVSHAR; PEYRARD, 1992) [(d)] e finalmente, em (e), a função de onda encontra-se no regime de auto-aprisionamento. A IM é usualmente vista como uma etapa primária para a formação de sólitons (FILHO, 2015), sendo um fenômeno muito importante e explorado pela literatura (FILHO, 2015; ZAKHAROV; OSTROVSKY, 2009; EVERITT et al., 2017; HASEGAWA, 1975; HASEGAWA; TAPPERT,

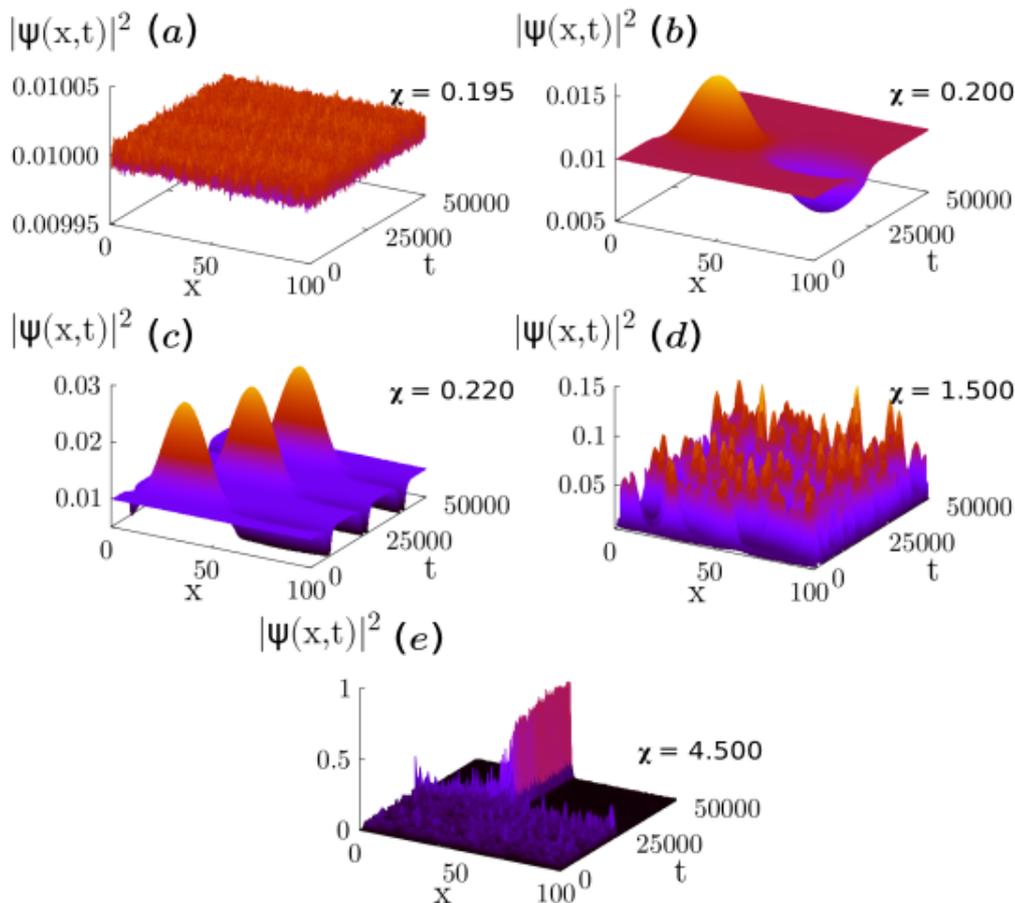
⁸ Note que considerar a interação elétron-fônon fez com que o termo não linear $-\chi |a_i|^2 a_i$, surgisse naturalmente ao efetuarmos os nossos cálculos.

⁹ Em inglês: Discrete nonlinear Schrödinger equation (DNLSE).

¹⁰ Do inglês: Continuous Wave.

¹¹ As ondas solitárias, observadas inicialmente por John Scott Russell em agosto de 1834, são chamadas de sólitons quando essas ao colidirem com outra onda solitária, não perdem a sua forma (LEMO, 2007).

Figura 10 – Simulação da transição entre regimes. Para alguns valores de χ , adicionamos um pequeno ruído $[\epsilon(x, t)]$: (a) Sistema estável, (b) ocorre a IM, (c) sistema evolui para o modo *breathing*, (d) oscilações irregulares e (e) *self-trapping*.



Fonte: Autor, 2021.

1973; ABLOWITZ et al., 2001; SILVA et al., 2009), devida à potencialidade em aplicações tecnológicas (SOUSA, 2015).

Agora que tomamos conhecimento desse fenômeno proveniente de sistemas não lineares, vamos apresentar os cálculos da análise de estabilidade linear, de modo a determinar o valor de interação efetiva (χ) acima do qual o sistema passa a ser instável. Para tal, primeiro iremos considerar a equação (2.31), apresentada na seção anterior, com uma pequena mudança de notação; $a_i \equiv \psi_n$:

$$i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} = J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \chi |\psi_n|^2 \psi_n. \quad (2.32)$$

A principal ideia dessa análise, consiste em avaliarmos a dinâmica do pacote de onda em torno do estado estacionário uniforme. Dessa forma, iremos dispor a equação (2.32) na sua versão contínua e fazer o estudo analítico, assim como feito na literatura (FILHO et al., 2015; CHAVES et al., 2015). Quando expandimos em Taylor os termos ψ_{n+1} e ψ_{n-1}

(KIVSHAR; PEYRARD, 1992; SOUSA, 2015), de modo que:

$$\psi_{n+1} = \psi_n + \Delta x \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \dots, \quad (2.33)$$

e

$$\psi_{n-1} = \psi_n - \Delta x \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \dots, \quad (2.34)$$

substituindo temos:

$$i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} = J[(\psi_n + \Delta x \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \dots) + (\psi_n - \Delta x \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \dots)] - \chi |\psi_n|^2 \psi_n, \quad (2.35)$$

ficando com:

$$i \frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \chi |\psi|^2 \psi, \quad (2.36)$$

que é a ESNL. Note que fizemos algumas considerações; $\Delta x^2 = 1$, $\hbar = 1$, o termo de *hopping* de primeiros vizinhos $J = 1$ e o termo de referencial de energia nulo. Podemos ainda escrever a equação acima como:

$$i \frac{d\psi}{dt} = \nabla^2 \psi - \chi |\psi|^2 \psi, \quad (2.37)$$

cuja a solução de onda contínua é da forma:

$$\psi(t) = \psi_0 e^{i\chi |\psi_0|^2 t}. \quad (2.38)$$

onde assumimos $\psi_0 \in \mathbb{R}$ sem perda de generalidade.

Agora que temos a equação (2.37) e a solução (2.38) em mãos, iremos fazer o estudo da análise de estabilidade linear¹². Para isto, iremos adicionar a pequena perturbação (ruído) na amplitude da solução (2.38), de modo que ficamos com:

$$\psi(x, t) = (\psi_0 + \epsilon(x, t)) e^{i\chi |\psi_0|^2 t}, \quad (2.39)$$

onde o $\epsilon(x, t)$ é muito menor do que a amplitude da onda ψ_0 , ou seja, $\epsilon(x, t) \ll \psi_0$.

Dizer que iremos adicionar uma pequena perturbação, significa que esse ruído (que pode ser causado por agentes externos) é levado em conta na dinâmica no início ($t = t_0$) dos estudos. Em seguida, colocamos o sistema para evoluir e investigamos, assim, a IM. Para obtermos a ESNL e avaliarmos a evolução temporal de $\epsilon(x, t)$, substituímos essa

¹² Método de análise da estabilidade linear consiste em um processo de linearização da equação de movimento de perturbações em ondas contínuas de sistemas não lineares, onde objetiva-se entender o comportamento deste sistema próximo ao seu estado de equilíbrio (SOUSA, 2015).

solução, (2.39), na equação (2.37), desprezando os $\epsilon(x, t)$ de mais alta ordem, e assim obtendo:

$$i \frac{d\epsilon(x, t)}{dt} = \nabla^2 \epsilon(x, t) - \chi |\psi_0|^2 (\epsilon(x, t) + \epsilon^*(x, t)). \quad (2.40)$$

Para a equação acima, usamos uma solução de onda harmônica, do tipo:

$$\epsilon(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx - \omega t)}, \quad (2.41)$$

onde k é o vetor de onda.

Resolvendo as equações acima, substituindo (2.41) na equação (2.40), seremos capazes e compreender a dinâmica do nosso ruído, encontrando uma relação de dispersão que irá nos fornecer as informações necessárias para determinarmos qual χ crítico para alcançarmos o regime de instabilidade modulacional (IM). Após alguma álgebra, encontramos as seguintes equações:

$$\begin{cases} (\omega - k^2 + \chi |\psi_0|^2)A + (\chi |\psi_0|^2)B = 0; \\ (-\chi |\psi_0|^2)A + (\omega + k^2 - \chi |\psi_0|^2)B = 0. \end{cases} \quad (2.42)$$

Reescrevendo as equações acima na forma matricial, temos:

$$\begin{pmatrix} \omega - k^2 + \chi |\psi_0|^2 & \chi |\psi_0|^2 \\ -\chi |\psi_0|^2 & \omega + k^2 - \chi |\psi_0|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0. \quad (2.43)$$

Reescrevemos (2.43) dessa forma porque queremos encontrar uma solução não trivial, de modo que o seu determinante é da forma:

$$\begin{vmatrix} \omega - k^2 + \chi |\psi_0|^2 & \chi |\psi_0|^2 \\ -\chi |\psi_0|^2 & \omega + k^2 - \chi |\psi_0|^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.44)$$

Assim, obtemos relação de dispersão

$$\omega = \sqrt{k^2(k^2 - 2\chi |\psi_0|^2)}. \quad (2.45)$$

Ao definirmos que $2\chi |\psi_0|^2 = k_{IM}^2$, em que k_{IM} é o vetor de onda característico, reescrevemos a expressão anterior como

$$\omega = \sqrt{k^2(k^2 - k_{IM}^2)}. \quad (2.46)$$

Olhando para a equação acima, podemos perceber que quando ω é real, ou seja, $k^2 > k_{IM}^2$, a solução de $\epsilon(x, t)$ (a nossa perturbação) dada pela equação (2.41), permanece como uma exponencial puramente imaginária ($e^{-i\omega t}$), por tanto estável. Por outro lado, quando $k^2 < k_{IM}^2$, ω é imaginário e assim teremos um ruído $[\epsilon(x, t)]$ crescendo exponencialmente ($e^{\omega t}$) e atingindo o regime de instabilidade modulacional. Encontramos então o momento acima do qual a solução dada pela equação (2.41), entra no regime de instabilidade

modulacional. Para acharmos agora o valor característico onde isso acontece, basta lembrarmos que a condição periódica de contorno permite que o vetor de onda k seja dado no intervalo:

$$\frac{2\pi}{L} < k < \frac{2\pi}{a}, \quad (2.47)$$

onde L é o tamanho lateral¹³ da cadeia e a é o espaçamento internuclear entre os sítios. Com $\psi_0 = 1/\sqrt{N}$, devemos então ter que:

$$k_{IM} = \sqrt{2\chi_{IM}|\psi_0|^2} = \frac{2\pi}{L}, \quad (2.48)$$

ou seja, no valor limite mínimo permitido para k . Portanto:

$$\chi_{IM} = \frac{2\pi^2 N}{L^2}, \quad (2.49)$$

onde para sistemas unidimensionais $L = N$, de modo que ficamos com:

$$\chi_{IM} = \frac{2\pi^2}{L}, \quad (2.50)$$

de modo que para $N = L = 100$, nos temos que a equação acima nos fornece:

$$\chi_{IM} \simeq 0.197. \quad (2.51)$$

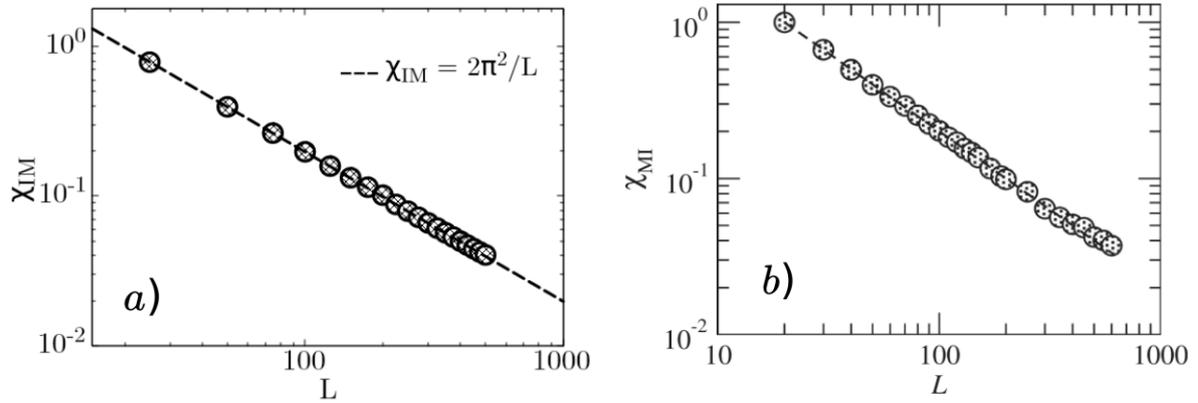
Esse resultado analítico nos permite avaliar o comportamento do χ crítico de instabilidade modulacional (χ_{IM}) em função do tamanho da cadeia, para um sistema unidimensional. Chaves e colaboradores (FILHO et al., 2015) apresentaram em 2015 esse resultado analítico e também os resultados numéricos acerca dele. Eles mostraram que para um sistema unidimensional cristalino, com condições periódicas de contorno e um elétron disposto uniformemente distribuído pela cadeia, que o χ_{IM} cai com o inverso do tamanho da ($\chi_{IM} \sim 1/L$) cadeia, de acordo com (2.50). O gráfico a seguir, retirado da referência (FILHO et al., 2015), mostra esse resultado:

A figura 11 mostra essas estimativas numéricas para o χ crítico de instabilidade modulacional em função do tamanho da cadeia, corroborando com o resultado analítico apresentado anteriormente. Na figura 11a tem a nossa reprodução numérica dessas estimativas. Reproduzir esse e outros resultados da referência (FILHO et al., 2015), nos serviu de base para a validação do nosso código computacional.

Já dispondo das principais ferramentas para o entendimento do nosso trabalho, apresentamos no próximo capítulo o nosso modelo. Para uma cadeia linear cristalina, com um elétron uniformemente distribuído e condições periódicas de contorno. Apresentamos então

¹³ A depender do problema, L tem um formato diferente. Para um arranjo unidimensional $L = N$ e $L = \sqrt{N}$ para redes quadradas (FILHO, 2015).

Figura 11 – Reprodução da estimativa numérica do acoplamento característico de IM versus tamanho da cadeia. Em *a)* nossa reprodução e em *b)* figura dos autores.



Fonte: Autor, 2021, [Filho et al.](#), 2015, respectivamente

um sistema com não linearidade saturada, ou seja, levamos em consideração que o parâmetro de interação elétron-rede (χ) possui saturação. Subsequentemente, apresentamos nossos resultados.

3 Instabilidade Modulacional com Não linearidade Saturada

3.1 Não Linearidade Saturada

A não linearidade saturada vem sendo estudada na literatura em diversos contextos (FLACH; GORBACH, 2008; KARTASHOV *et al.*, 2011; SANTOS *et al.*, 2015; LYRA; GOUVEIA-NETO, 1994; NITHYANANDAN, 2013; SAMUELSEN *et al.*, 2013; ASSUNÇÃO *et al.*, 2014; CAO *et al.*, 2014). No contexto óptico, Gatz e Herrmann (1991) (GATZ; HERRMANN, 1991), reportaram o estudo de propagação de sóliton em materiais com não linearidade saturada, para uma equação de Schrödinger generalizada. Em 2008, Lyra e colaboradores (SILVA *et al.*, 2009) apresentaram um estudo de IM em fibras ópticas, onde considerando pequenas perturbações harmônicas para a solução estacionária, obtiveram uma relação de dispersão exata para as componentes de Fourier do campo de perturbação que inclui os efeitos de saturação e de relaxação. Em 1993, Miguel Hickmann *et al.* (HICKMANN *et al.*, 1993), apresentaram uma análise teórica da instabilidade modulacional (IM) em fibras de vidro dopadas com semicondutores, em um regime de estado estacionário, levando em conta uma não linearidade saturada. Os autores mostraram que a frequência crítica de modulação e de ganho aumentam com a potência de entrada, atingindo valor máximo na potência de saturação. Além disso, mostraram que essas frequências exibem um comportamento biestável, onde relacionaram a existência de dois estados de *solitons* para esse tipo de sistema (GATZ; HERRMANN, 1991). A não linearidade saturada usada pelos autores foi:

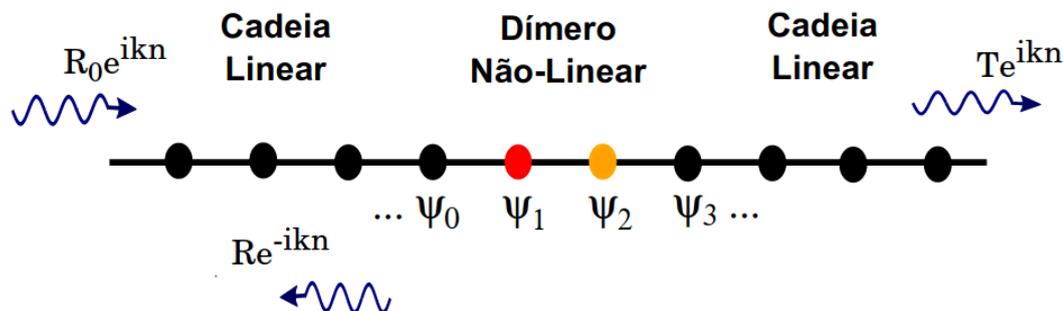
$$f(|A|^2) = \frac{\gamma|A|^2}{1 + \Gamma|A|^2}, \quad (3.1)$$

onde A é o envelope de amplitude de campo elétrico, γ é o parâmetro não linear, $\Gamma = 1/P_{sat}$ é o parâmetro de saturação e P_{sat} é a potência de saturação.

Além dos autores supracitados, a não linearidade saturada, equação (3.1), é reportada por outros autores na literatura (SANTOS *et al.*, 2015; LYRA; GOUVEIA-NETO, 1994; SAMUELSEN *et al.*, 2013; ASSUNÇÃO *et al.*, 2014; HERRMANN, 1991). Em 2014, Assunção, Nascimento, e Lyra (ASSUNÇÃO *et al.*, 2014; ASSUNÇÃO, 2015), estudaram um dímero não linear assimétrico acoplado a duas cadeias lineares, onde investigaram a influência da não linearidade saturada na obtenção de transmissão não recíproca e no fenômeno de biestabilidade. A figura 12 mostra como os autores esquematizaram o problema.

Os autores mostraram que o comportamento biestável, que favorece uma forte ação retificadora, é suprimido na presença de saturação, isso porque, o dímero se torna efetiva-

Figura 12 – Dímero assimétrico e não linear.



Fonte: Retirada da referência (ASSUNÇÃO, 2015).

mente linear para grandes valores de intensidade da onda incidente. Contudo, para uma fraca saturação, a transmissão não recíproca pode ter uma influência positiva.

Em 2015, dos Santos e colaboradores (SANTOS et al., 2015) estudaram o papel da não linearidade saturada no transporte eletrônico em uma cadeia desordenada. Eles mostraram que a não linearidade saturada pode promover um espalhamento sub-difusivo do pacote de onda inicialmente localizado, mesmo na presença de desordem. Foi mostrado também que a saturação mais a não linearidade, pode promover modos do tipo *breathing* na evolução do pacote de onda. Nesses trabalhos que acabamos de apresentar, a não linearidade saturada foi incorporada na ESNL, da forma:

$$f(|\psi|^2) = \frac{\chi|\psi|^2}{1 + \zeta|\psi|^2}, \quad (3.2)$$

onde χ é o parâmetro de intensidade não linear e ζ é o parâmetro que regula o grau de saturação da não linearidade.

A saturação atua como fator limitante na interação efetiva da função de onda com a cadeia não linear, sendo ainda, responsável por trazer novas informações acerca do sistema (ASSUNÇÃO, 2015). Em fibras ópticas e guias de ondas de altos índices de refração, a resposta não linear satura conforme a intensidade do campo é aumentada (SILVA et al., 2009). Temos ainda que afeta o espectro de ganho da IM e o ganho máximo (LYRA; GOUVEIA-NETO, 1994). Para metamateriais, Maluckov e colaboradores (2008) (MALUCKOV et al., 2008) mostraram que a resposta do meio é fortemente afetada pela não linearidade saturada. Xiang e coautores em 2011 (XIANG et al., 2011) também estudaram a influência da não linearidade saturada em metamateriais. Esses e outros trabalhos são amplamente investigados na literatura (GUZMÁN-SILVA et al., 2013; WU et al., 2020; SHI et al., 2013; DONG et al., 2021).

Dessa forma, para o modelo de Holstein em uma rede unidimensional cristalina, com condições periódicas de contorno e elétron uniformemente distribuído, assim como na referência (FILHO et al., 2015), iremos adotar uma não linearidade saturada como apresentada pela referência (SANTOS et al., 2015). Apesar de encontrarmos estudos

sobre IM com não linearidade na literatura, assim como na referência (HICKMANN et al., 1993), nós trazemos aqui uma nova abordagem acerca desse assunto. Ao substituímos χ pelo termo dado por (3.2), estaremos aptos para investigar o que acontece com a IM, quando a não linearidade possui saturação, onde traremos novos resultados para o sistema proposto. Na próxima seção, apresentamos a nossa ESNLD com não linearidade saturada. Calculando a função participação e a densidade de probabilidade, mostraremos para a instabilidade modulacional e o auto-armadilhamento, o papel da não linearidade saturada no nosso sistema.

3.2 Modelo

Já mencionamos anteriormente que vamos investigar a instabilidade modulacional (IM) em uma rede unidimensional cristalina com não linearidade saturada. O hamiltoniano para nosso sistema já foi apresentado e é da forma

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \frac{M\omega^2 \hat{X}_n^2}{2} + J \sum_{n=1}^N (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) + A \sum_{n=1}^N \hat{X}_n c_n^\dagger c_n, \quad (3.3)$$

onde M é a massa efetiva, ω é a frequência dos osciladores, \hat{X}_n é o operador posição relacionado com o grau de vibracional x_n , J é o termo de *hopping*, que iremos considerar unitário ($J = 1$), c_n^\dagger e c_n são os operadores criação e aniquilação e A representa o acoplamento elétron-rede com as vibrações da rede no sítio n . Tendo em mãos a equação acima, é possível encontrarmos a equação de Schrödinger não linear discreta (ESNLD) efetiva, que foi demonstrada no capítulo anterior. Então, temos que:

$$i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} - \chi |\psi_n|^2 \psi_n, \quad (3.4)$$

onde $\chi = \frac{A^2}{M\omega^2}$ é o parâmetro que fornece o grau de interação efetiva do acoplamento elétron-fônon. A equação acima foi construída a partir de um sistema sem saturação e parâmetro não linear χ . A partir de agora, iremos modelar o parâmetro não linear por:

$$f(|\psi|^2) = \frac{\chi}{1 + \zeta |\psi_n|^2}, \quad (3.5)$$

de forma que iremos ter uma ESNLD com não linearidade saturada, dada por:

$$i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} - \frac{\chi}{1 + \zeta |\psi_n|^2} |\psi_n|^2 \psi_n, \quad (3.6)$$

onde ζ é o parâmetro que regula o grau de saturação da não linearidade. Imediatamente, vemos que quando $\zeta = 0$, a equação (3.6) retorna para a equação (3.4) e assim, sem saturação.

Para os resultados que iremos apresentar, a condição inicial da função de onda é agora evidenciada. Iremos considerar que o elétron está inicialmente distribuído de maneira

uniforme, de modo que a função de onda inicial é a superposição de uma onda uniforme com amplitudes em cada sítio da forma:

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (3.7)$$

e ainda com uma pequena perturbação, colocada apenas no instante inicial (em termos numéricos, adicionamos o ruído antes de iniciar a dinâmica do sistema, ou seja, ele é adicionado e, em seguida, investigamos os efeitos causados no sistema.), com amplitudes aleatoriamente distribuídas em cada sítio dentro do intervalo ¹

$$\left[-\frac{1}{2}10^{-3}\psi_0, \frac{1}{2}10^{-3}\psi_0\right]. \quad (3.8)$$

A normalização da função de onda é considerada, e também acompanhada ao longo de toda a evolução temporal, onde o critério de conservação é estabelecido para validação dos resultados. Além disso, usamos uma condição periódica de contorno, como apresentada na introdução desse trabalho.

Para resolvermos numericamente a equação (3.6), usamos o método de Runge Kutta de oitava ordem (VALLE, 2012; PRESS SAUL A. TEUKOLSKY; FLANNERY, 1992; COOPER; VERNER, 1972), para um programa feito em Fortran 90. Além disso, calculamos a função participação, definida como

$$P(t) = \frac{1}{\sum_n |\psi_n|^4}, \quad (3.9)$$

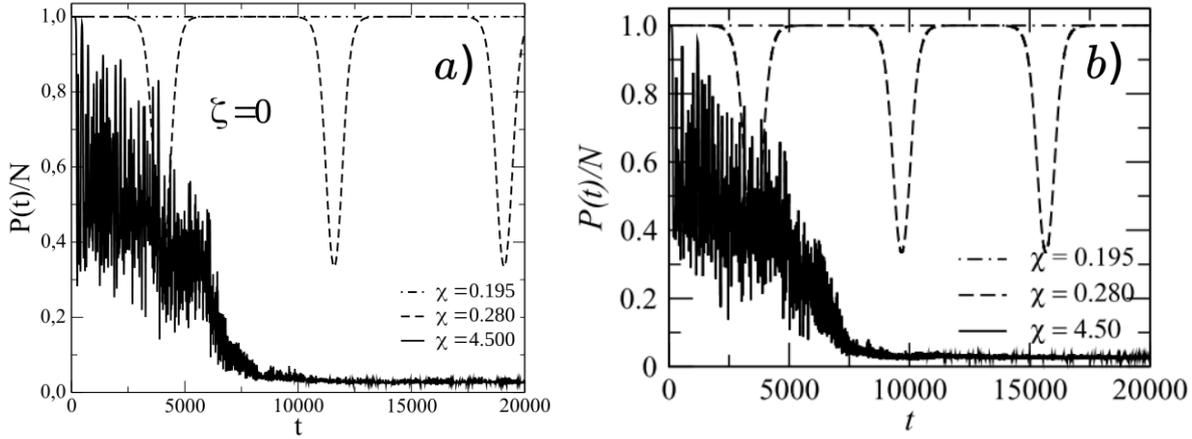
que nos fornece a medida da porção do espaço onde a amplitude da função de onda difere significativamente de zero (DIAS, 2011; KRAMER; MACKINNON, 1993). Essa quantidade foi aplicada nos estudos de IM e auto-armadilhamento para cadeias lineares e rede quadradas (FILHO et al., 2015). Também no estudo da dinâmica de pacotes de onda de um elétron em topologias do fulereno C_{60} (CHAVES et al., 2015).

Na figura figura 13, nós temos a função participação para $\zeta = 0$ e três valores de intensidade não linear $\chi = 0.195, 0.280$ e 4.500 , para um tamanho de cadeia $L = 100$ e com a dinâmica indo até o tempo $t_{m\acute{a}x} = 20000$.

Quando a participação é máxima, $P(t)/N = 1$, temos que a função de onda permaneceu uniforme por toda a cadeia, o ruído não amplificou e assim, a função de onda continua em um regime de estabilidade. Quando $P(t)/N < 1$, indica que as contribuições não lineares e dispersivas amplificaram o ruído, de modo que a função de onda mudou de regime. Vemos que $P(t)/N = 1$ para $\chi = 0.195$, ou seja, a função de onda eletrônica está em um regime de estabilidade. Quando $\chi = 0.280$, notamos que a função participação inicia um padrão oscilatório periódico, de modo que a função de onda encontra-se em um regime de IM. Para esse regime, a transição ocorre em um $\chi_{crítico} \sim 0.2$. Quando o parâmetro não linear é $\chi = 4.500$, após um transiente de oscilações irregulares, a função de onda entra em

¹ Outros tamanhos de ruídos foram testados e a dinâmica não foi, a priori, alterada em nada.

Figura 13 – Evolução temporal da função participação normalizada. Para um tamanho de cadeia $N = 100$, uma função de onda inicialmente distribuída pela cadeia e $\chi = 0.195, 0.280$ e 4.500 . Em *a*) nossa reprodução e em *b*) figura dos autores.



Fonte: Autor, 2021, [Filho et al.](#), 2015, respectivamente

no regime de auto-armadilhamento. Esse regime de auto-armadilhamento (*self-trapping*) ocorre para um $\chi_{crítico} \sim 4$. A reprodução da figura 13, está de acordo com a literatura e reforça a validação do nosso código computacional.

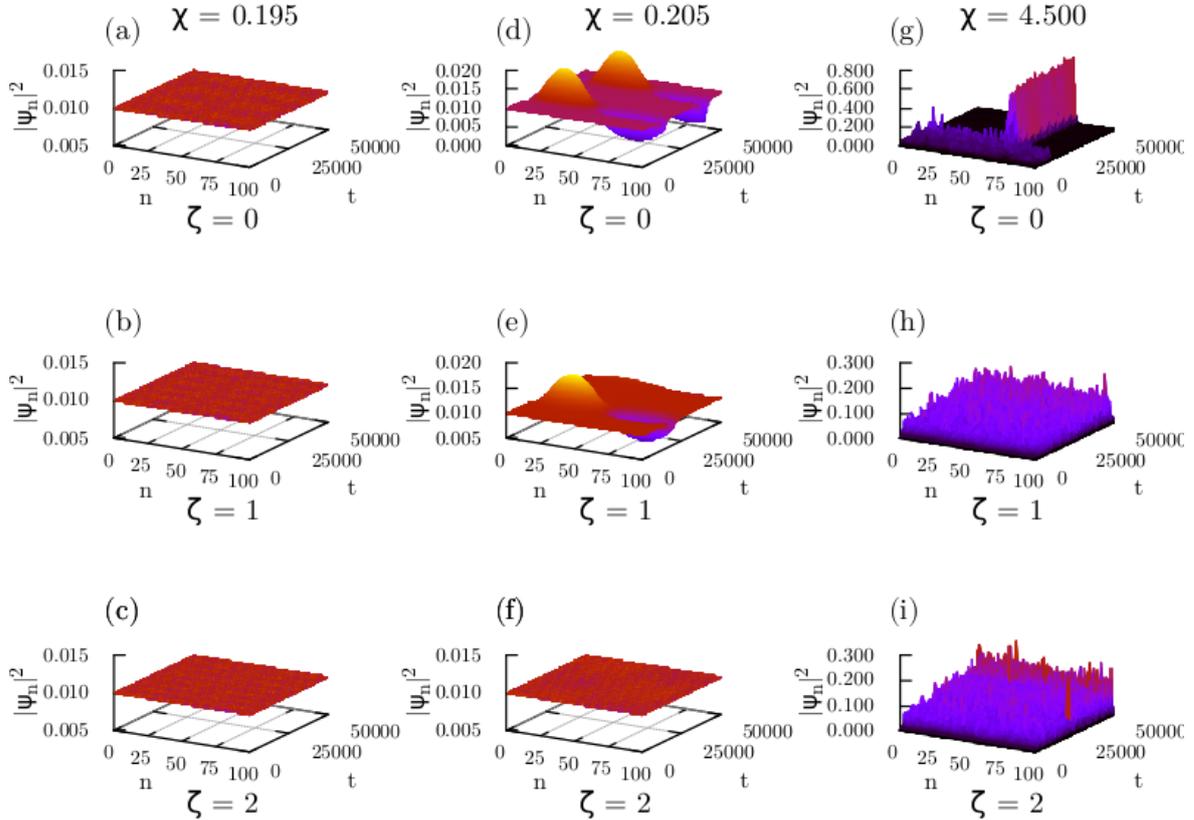
Na seção subsequente apresentamos os nossos resultados e discussões, onde avaliamos o papel da não linearidade saturada para uma cadeia com condições periódicas de contorno.

3.3 Resultados e Discussões

Após resolvermos a equação (3.6), calculamos a densidade de probabilidade da função de onda, $|\psi|^2$, e obtemos a figura 14, como veremos mais adiante.

Como visto anteriormente, para um sistema sem saturação ($\zeta = 0$) o valor crítico para alcançarmos instabilidade modulacional é $\chi_{IM} \simeq 0.197$. A figura 14, com $N = 100$ sítios, evoluindo até 50000 passos de tempo (com discretização $dt = 10^{-2}$), nos fornece alguns resultados para $\zeta = 0$ e $\zeta = 1$ e 2 . Na primeira coluna, de (a – c), usamos um valor de acoplamento não linear $\chi = 0.195$, para três valores de saturação $\zeta = 0, 1$ e 2 . Podemos ver que para o regime estável, a não linearidade saturada não modifica a dinâmica da função de onda, permanecendo estável, mesmo com o aumento do grau de saturação da não linearidade. Por outro lado, quando $\chi = 0.205$, em (d – f), para um sistema onde $\zeta = 0$, observamos que o regime estável atingiu o estágio de instabilidade modulacional, ou seja, a função de onda evoluiu para um padrão regular localizado de *breathing*. Quando $\zeta = 1$, em (e), vemos que a solução oscilatória reduz a amplitude e frequência das respirações, enquanto para $\zeta = 2$, o regime de solução oscilatória retoma para o regime de estabilidade. Assim, o grau de saturação da não linearidade (ζ) parece

Figura 14 – Evolução temporal da densidade de Probabilidade da função de onda. De (a – c) $\chi = 0.195$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 ; De (d – f) $\chi = 0.205$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 ; De (g – i) $\chi = 4.500$ e $\zeta = 0, 1$ e 2 . Para uma cadeia com $N = 100$ sítios e evolução temporal até 50000 passos de tempo.



Fonte: Autor, 2021.

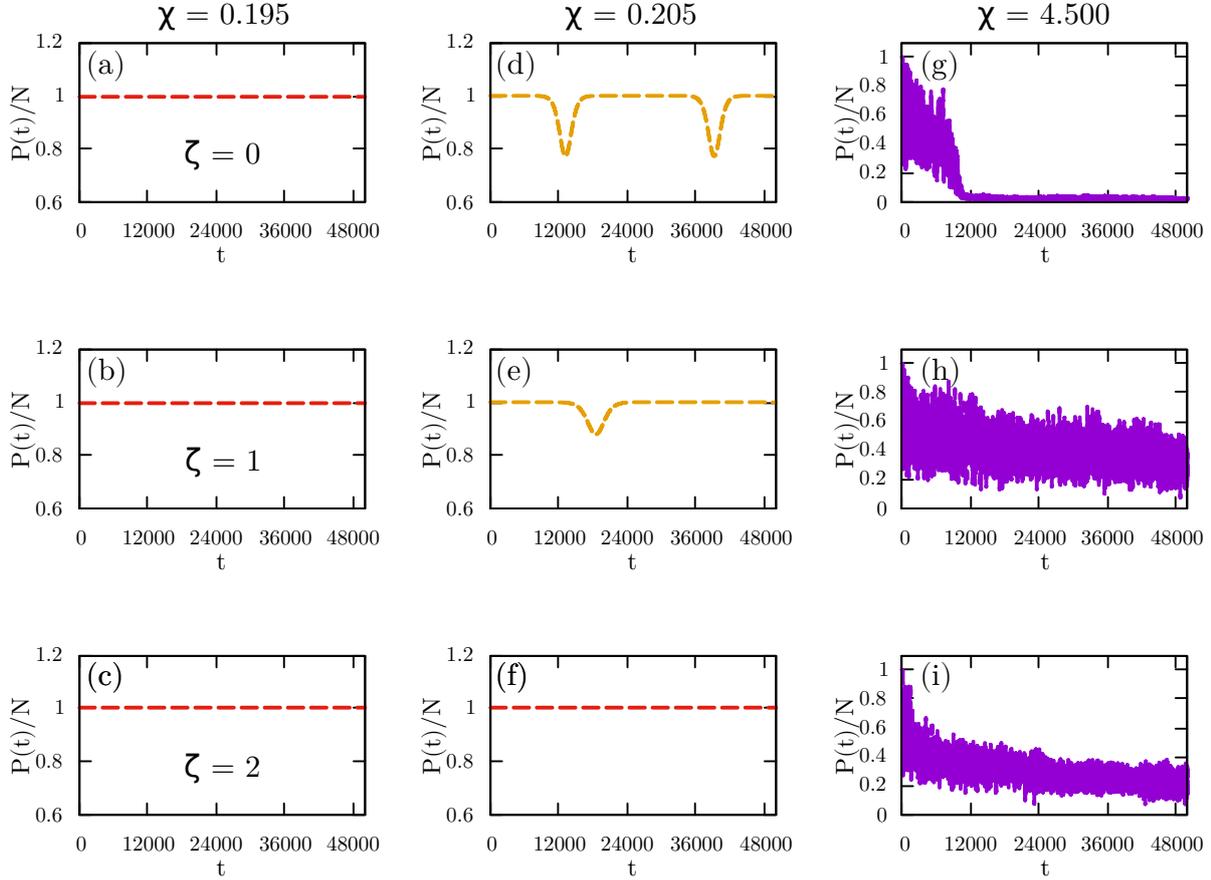
ser o responsável por essa transição do regime de instabilidade modulacional para o de estabilidade. Ao aumentarmos o valor do acoplamento não linear, $\chi = 4.500$, observamos que, após um transiente na qual a função de onda exibe um caráter irregular na sua dinâmica (*chaotic-like* (FILHO et al., 2015)), a função de onda atinge a solução estável localizada (*self-trapping*), visto em (g). Com $\zeta = 1$ e 2 , em (h) e (i), respectivamente, o regime de *self-trapping* retorna para o estágio de dinâmica irregular.

Para reforçarmos o que foi visto na figura 14, calculamos a função participação, definida na equação 3.9.

Vemos na figura 15, a função participação normalizada. Para essa análise, temos que a função de onda se encontra no regime estável e quando a participação normalizada é menor que a unidade ($P(t)/N < 1$), significa que a função de onda se encontra indo para um regime localizado.

Para a função participação (figura 15), também para $N = 100$ e evoluindo o sistema até 50000 passos de tempo, vemos o grau de localização da função de onda para $\chi = 0.195, 0.205$ e 4.500 e também para o grau de saturação da não linearidade $\zeta = 0, 1$ e 2 . De (a – c) a função participação permanece durante toda a dinâmica, com valor constante $P(t)/N = 1$

Figura 15 – Evolução temporal da função participação. De (a – c) $\chi = 0.195$ e $\zeta = 0, 1$ e 2; De (d – f) $\chi = 0.205$ e $\zeta = 0, 1$ e 2; De (g – i) $\chi = 4.500$ e $\zeta = 0, 1$ e 2. Para uma cadeia com $N = 100$ sítios e evolução temporal até 50000 passos de tempo.



Fonte: Autor, 2021.

(linha tracejada de cor vermelha) mesmo para $\zeta \neq 0$, indicando que o regime é de estabilidade, ou seja, a pequena perturbação (ruído) não amplifica, evoluindo o sistema para as oscilações localizadas.

Isso só ocorre quando $\chi_{IM} \simeq 0.197$, como vemos na coluna do meio da figura 15, quando $\chi = 0.205$. O regime de instabilidade é alcançado, indicado pelas respirações periódicas na função participação, vistas em *d*) e para $\zeta = 0$. Note que a participação sai de $P(t)/N = 1$ e cai até um valor mínimo $P(t)/N = 0.8$, sendo este o pico da respiração vista na figura 14 em *d*). Quando $\zeta = 1$, (em *e*), a amplitude da respiração é menor, sinalizando que a função de onda está retomando o regime inicial de estabilidade. Vemos isso acontecer quando $\zeta = 2$ na figura interna *f*), a respiração não acontece, revelando a estabilidade. Olhando agora para a última coluna, para $\chi = 4.500$, em *g*), temos *self-trapping* ($P(t)/N \simeq 0$). A função de onda atingiu a solução estável localizada, após um transiente de oscilações irregulares, como podemos ver na figura. Ao incorporar a

saturação, para $\zeta = 1$ e 2 , o *self-trapping* não é alcançado, permanecendo no regime de oscilações irregulares.

Vimos no capítulo anterior, a estimativa numérica para o χ de IM. Temos então que o χ crítico analítico é dado por:

$$\chi_{IM,\zeta_0} = \frac{2\pi^2}{L}, \quad (3.10)$$

onde o subscrito em ζ_0 , indica que $\zeta = 0$. Para encontrarmos essa estimativa analítica para $\zeta \neq 0$, usamos o parâmetro χ apresentado seção anterior:

$$\chi \longrightarrow \frac{\chi}{1 + \zeta |\psi_0|^2}, \quad (3.11)$$

e dessa forma, resolvendo para a relação de dispersão, semelhantemente como fizemos no capítulo de fundamentação teórica (ver apêndice B), ficamos com:

$$\omega = \sqrt{k^2 \left(k^2 - \frac{2\chi}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} |\psi_0|^2 \right)}, \quad (3.12)$$

onde ω pode ser escrito como:

$$\omega = \sqrt{k^2(k^2 - k_{IM,\zeta}^2)}. \quad (3.13)$$

Para acharmos a estimativa numérica para IM, quando $\zeta \neq 0$, dentro da condição periódica de contorno, o vetor de onda k se encontra no intervalo:

$$\frac{2\pi}{L} < k < \frac{2\pi}{a}, \quad (3.14)$$

onde L é o tamanho lateral da cadeia e a é o espaçamento internuclear entre os sítios. Temos então que:

$$k_{IM,\zeta} = \frac{2\pi}{L}, \quad (3.15)$$

ou seja, no valor limite mínimo permitido para k . Portanto:

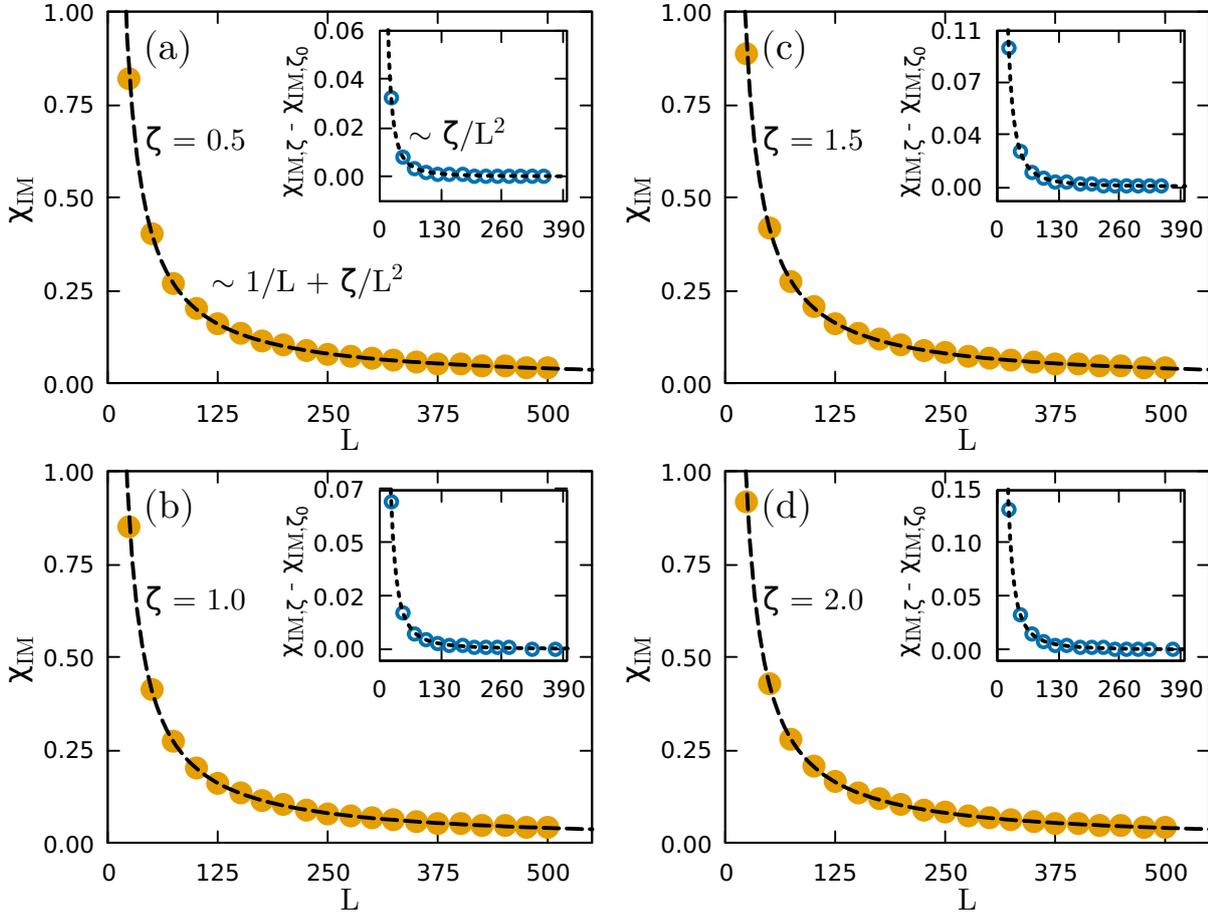
$$\chi_{IM,\zeta} = \frac{2\pi^2 N}{L^2} \left(1 + \zeta \frac{1}{N}\right)^2, \quad (3.16)$$

onde para sistemas unidimensionais, $L = N$, e desconsiderando termos de mais alta ordem, ficamos com:

$$\chi_{IM,\zeta} = \frac{2\pi^2}{L} + \frac{4\pi^2 \zeta}{L^2}. \quad (3.17)$$

Esse resultado analítico traz uma total concordância com os nossos resultados numéricos, uma vez que a relação $\sim 1/L^2$ também é observada. A estimativa numérica é mostrado

Figura 16 – Estimativa numérica da dependência do acoplamento característico de IM com o tamanho da cadeia, para letra a) $\zeta = 0.5$, b) $\zeta = 1.0$, c) $\zeta = 1.5$ e d) $\zeta = 2$.



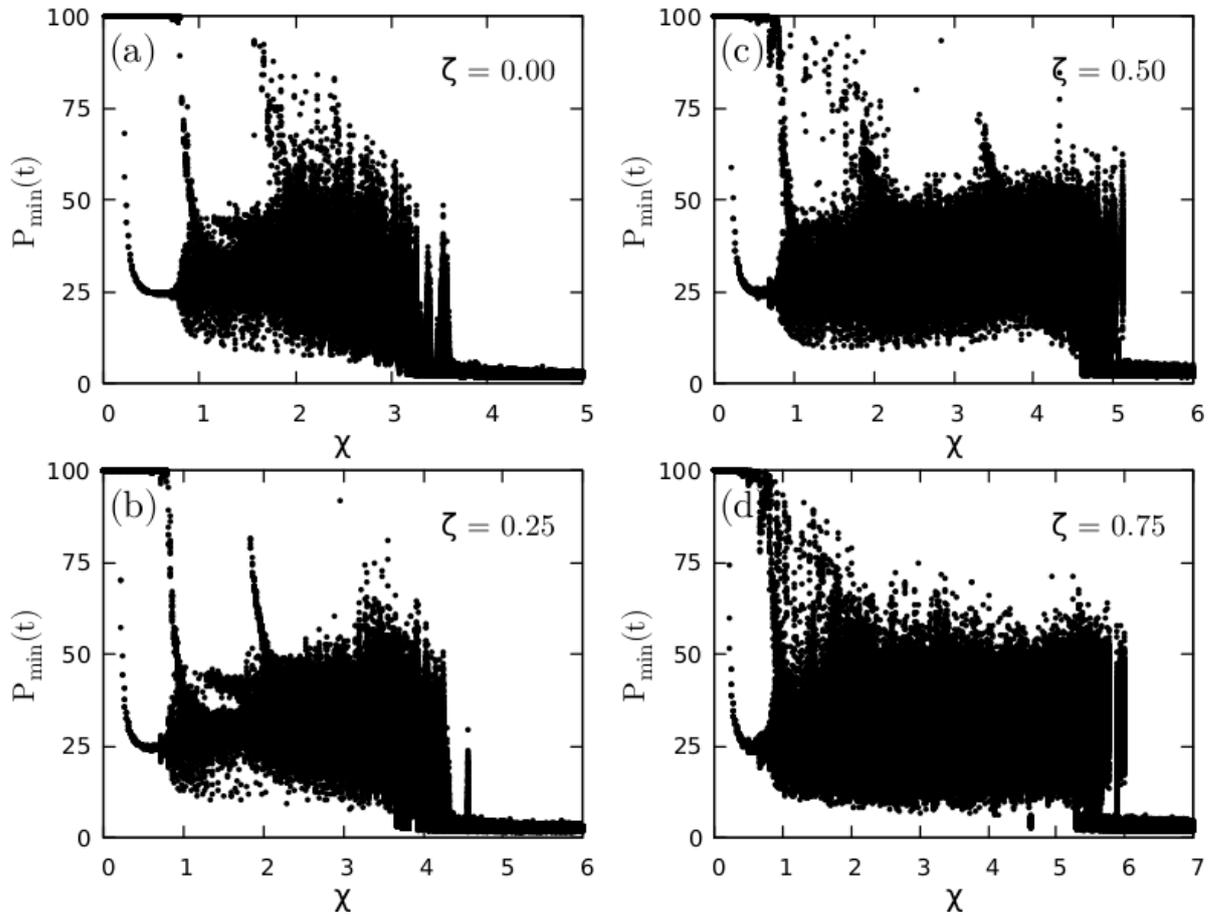
Fonte: Autor, 2021.

na figura 16, como vemos mais adiante. Para $\zeta = 0$, retornamos para a equação (2.50), ou ainda:

$$\chi_{IM,\zeta_0} = \frac{2\pi^2}{L}. \quad (3.18)$$

Como mostrado anteriormente, Chaves *et al* (2015) mostraram que o χ crítico de instabilidade modulacional cai proporcionalmente com o inverso do tamanho da cadeia ($\chi_{IM} \sim 1/L$), para um sistema cujo o ζ não se faz presente (figura 11). Por outro lado, no nosso modelo, para $\zeta \neq 0$ temos um comportamento diferente. A estimativa numérica pode ser vista na figura 16, para diversos tamanhos de cadeia ($N = L = 25, 50, 75, \dots, 500$) e para alguns valores de ζ ($= 0.5, 1.0, 1.5$ e 2.0). Para esta figura, não usamos a escala logarítmica como na figura 11, pois queremos mostrar a diferença nos valores de χ_{IM} . Na letra a) temos a estimativa numérica para $\zeta = 0.5$. Os pontos laranjas são os valores de χ_{IM} para cada tamanho da cadeia, onde vemos que escalam com o inverso do tamanho da cadeia mais o tamanho da cadeia ao quadrado, $\chi_{IM,\zeta} \sim 1/L + \zeta/L^2$, as curvas tracejadas,

Figura 17 – Mínimos da função participação para valores do grau de saturação da não linearidade (a) $\zeta = 0.00$, (b) $\zeta = 0.25$, (c) $\zeta = 0.50$ e (d) $\zeta = 0.75$.



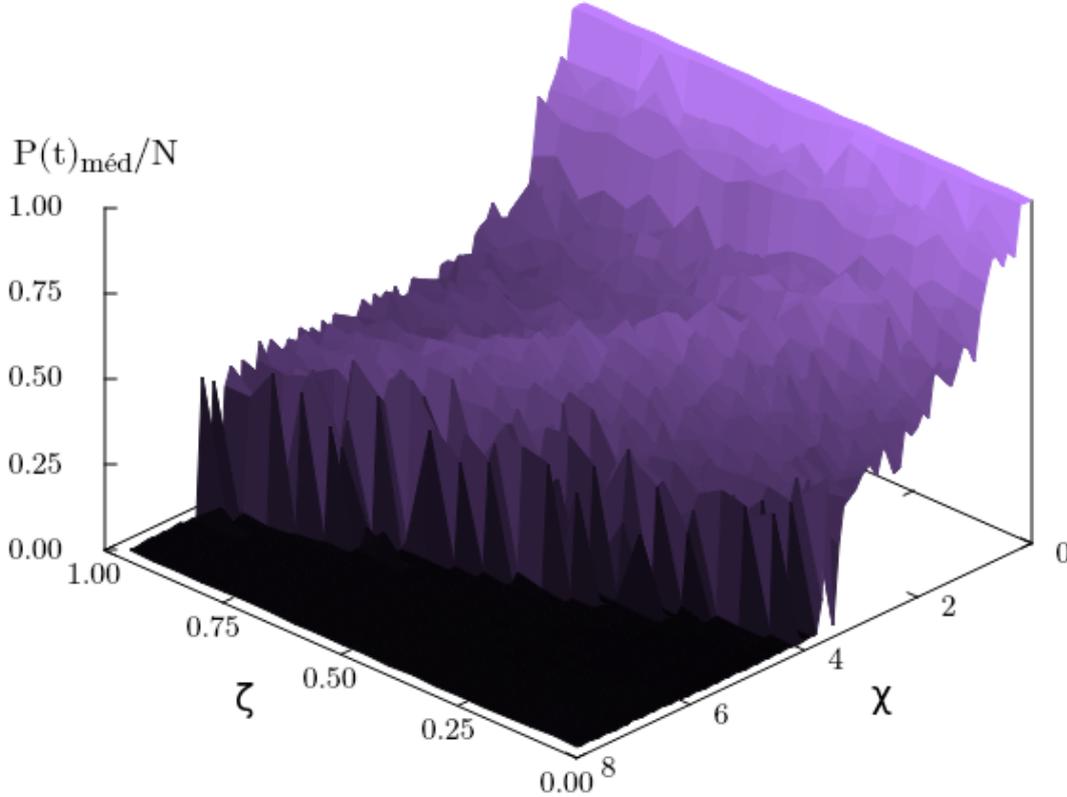
Fonte: Autor, 2021.

corroborando com o resultado analítico dado pela equação (3.17). O mesmo comportamento vemos para $\zeta = 1.0, 1.5$ e 2.0 , nas figuras internas *b*), *c*) e *d*), respectivamente. Note que, à medida que aumentamos ζ , o χ_{IM} é deslocado. Fizemos a diferença entre os χ_{IM} para $\zeta = 0$ e $\zeta \neq 0$, isso para olharmos para o quanto χ_{IM} deslocou. Essa diferença pode ser vista nos insets (círculos de cor azul) da figura 11, em *a*), *b*), *c*) e *d*). É possível ver que quando aumentamos o valor da saturação, χ_{IM} também aumenta ligeiramente, como vemos nos insets da figura. Para gerarmos o ajuste nos *insets* (linha pontilhada), fizemos o *fitting* e a diferença entre as equações (3.17) e (3.18), que resultou em:

$$\chi_{IM,\zeta} - \chi_{IM,\zeta_0} \sim \zeta \frac{1}{L^2}. \quad (3.19)$$

Para uma análise mais detalhada do comportamento do sistema em relação aos parâmetros χ e ζ , calculamos a função participação e computamos todos os valores mínimos de $P(t)$ dentro do intervalo temporal $80000 < t < 100000$. A figura 17 mostra os resultados desses cálculos para $\zeta = 0, 0.25, 0.50$ e 0.75 . Para um sistema sem saturação, em *a*), podemos observar no topo da figura, para $\chi \simeq 0$ vários pontos com valor de participação

Figura 18 – Função Participação média. Para parâmetro $\chi = 0$ até 8 e grau de saturação $\zeta = 0$ até 1.



Fonte: Autor, 2021.

$P_{min}(t) = 100$, isso significa que o sistema ainda é estável. Quando $\chi \simeq 0.2$, a dinâmica muda e entramos no regime de oscilações localizadas periódicas, dando início a IM. Esse regime se estende até $\chi \simeq 0.8$, quando temos uma nova ramificação dentro de uma faixa de valores de χ bem reduzida, $\chi \simeq 0.8$ até $\chi \simeq 1.0$. Para essa faixa de valores as oscilações aumentam bastante e temos, principalmente, $P_{min}(t)$ dentro de dois estados localizados. Quando $\chi \simeq 1.0$ entramos no regime de oscilações irregulares, que se estende até $\chi \simeq 3.8$. Nesse intervalo, os valores de participação ocupam uma grande e densa região do sistema. Após isto, para $\chi > 3.8$, atingimos o regime de auto aprisionamento (*self-trapping*). Essa primeira figura, *a*), corroboram com os resultados obtidos por Chaves *et al* em 2015. De forma análoga ao χ_{IM} , olhando para as figuras internas *b*), *c*) e *d*), quando aumentamos a saturação, o χ crítico para o regime de *self-trapping* (ST) também cresce. Note que para $\zeta = 0.25$, $\chi_{ST} \simeq 4.6$, para $\zeta = 0.50$, $\chi_{ST} \simeq 5.1$ e para $\zeta = 0.75$, $\chi_{ST} \simeq 6.0$.

Para corroborar com o resultado da figura 17 sobre os χ críticos de *Self-trapping*, calculamos novamente a função participação até o tempo 40000 e computamos a média dos últimos 4000 passos de tempo. Para uma gama de valores de χ e ζ , montamos a

figura acima. Como podemos ver na figura 18, à medida que aumentamos o valor do grau de saturação da não linearidade, o valor do χ crítico de *self-trapping* também cresce, assim como mostramos na figura anterior. Nessa figura, a região de cor roxa indica que ainda não há o regime de *self-trapping*, mas ao ultrapassarmos essa região, conseguimos auto-armadilhar a função de onda.

Durante toda essa seção, nós expomos os resultados com relação aos parâmetros de intensidade não linear (χ) e o grau de saturação da não linearidade (ζ). Mostramos que quando a saturação se faz presente, nós podemos retomar regimes anteriores ao atual, tendo assim uma transição de regimes causada pela saturação. Além disso, mostramos que a saturação da não linearidade, desloca os χ 's críticos de transição de regimes. Vimos também que o χ_{IM} cai proporcionalmente ao inverso do tamanho da cadeia mais o inverso do tamanho da cadeia ao quadrado. Esses e outros resultados inéditos estão sendo avaliados para iniciarmos a escrita do artigo que será publicado.

4 Conclusões e Perspectivas

Nessa dissertação, nós estudamos a instabilidade modulacional (IM) para um sistema unidimensional, usando o modelo de Holstein, onde modos de vibração são considerados (fônons). A função de onda eletrônica interage com esses modos de vibração, de modo que temos uma interação elétron-fônon, como conhecemos na literatura. Através desse tipo de interação, nos podemos investigar fenômenos não lineares. IM e auto-armadilhamento são algumas das fenomenologias que encontramos na literatura. Após considerarmos uma não linearidade saturada, condições periódicas de contorno e uma condição inicial da função de onda uniforme, nós investigamos o papel da saturação acerca dessas fenomenologias. Usando um método numérico de Runge Kutta, para um programa em fortran 90, medimos a função participação e a densidade de probabilidade da função de onda. Encontramos que quando aumentamos a saturação, podemos observar uma transição entre regimes. Vimos também que os valores de χ críticos que alteram os regimes da função de onda, são deslocados com a inserção de saturação ζ . Além disso, o χ de IM que cai com o inverso do tamanho da cadeia ($\chi_{IM,\zeta_0} \sim 1/L$), quando a saturação se faz presente, passa a ter um comportamento diferente. Esse χ cai agora com o inverso do tamanho da cadeia mais o tamanho da cadeia ao quadrado. Para o auto-armadilhamento, vimos que χ_{ST} também é deslocado, assim como ocorre com o de IM. Apesar de encontrarmos na literatura estudos sobre IM com não linearidade saturada (HICKMANN *et al.*, 1993), o trabalho aqui apresentado possui uma nova abordagem, trazendo informações sobre a existência de diferentes regimes, como a não linearidade crítica depende do tamanho da cadeia e qual a influência da saturação sobre os regimes, por exemplo.

Como perspectivas futuras, iremos investigar em mais detalhes o comportamento do auto-armadilhamento com a inserção da saturação. Na figura onde calculamos a participação média, não fomos capazes de analisar os demais regimes, isso porque a medida escolhida não foi satisfatória. Sendo assim, essa figura também entrará nas nossas perspectivas futuras. Ademais, vamos investigar o papel da saturação no χ , de modo a vermos a possibilidade de ter a estimativa numérica do acoplamento não linear com o tamanho da cadeia e a saturação.

Referências

ABLOWITZ, M. J. et al. Long-time dynamics of the modulational instability of deep water waves. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 152-153, p. 416–433, maio 2001. ISSN 0167-2789. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016727890100183X>>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.

AKHMEDIEV, N.; ANKIEWICZ, A.; SOTO-CRESPO, J. M. Rogue waves and rational solutions of the nonlinear Schrödinger equation. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 80, n. 2, p. 026601, ago. 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80.026601>>. Citado na página 17.

AMARAL, P. H. R. *Efeitos não-adiabáticos na espectroscopia de alta resolução de moléculas primordiais*. Tese (phdthesis) — Universidade Federal de Minas Gerais, out. 2019. Disponível em: <http://lilith.fisica.ufmg.br/~posgrad/Teses_Doutorado/decada2010/paulo-amaral/PauloHenriqueRibeiroAmaral-tese.pdf>. Citado na página 23.

AMIRI, I.; ALAVI, S. E.; IDRUS, S. M. Introduction of Fiber Waveguide and Soliton Signals Used to Enhance the Communication Security. In: . [S.l.: s.n.], 2015. Citado na página 17.

AMIRI, I. S.; AFROOZEH, A.; AHMAD, H. *Integrated Micro-Ring Photonics: Principles and Applications as Slow Light Devices, Soliton Generation and Optical Transmission*. [S.l.: s.n.], 2015. ISBN 9781138027831. Citado na página 17.

AMIRI MZ ZULKIFLI, H. A. I. Soliton comb generation using add drop ring resonators. *International research journal of telecommunications and information technology*, ago. 2014. ISSN 0713 - 9713. Disponível em: <https://www.researchgate.net/profile/Iraj_Sadegh_Amiri/publication/264549314_Soliton_Comb_Generation_Using_Add-Drop_Ring_Resonators/links/597f03f00f7e9b8802eba47a/Soliton-Comb-Generation-Using-Add-Drop-Ring-Resonators.pdf>. Citado na página 17.

ANDERSON, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review*, American Physical Society, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, mar. 1958. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1492>>. Citado na página 16.

ANKER, T. et al. Nonlinear Self-Trapping of Matter Waves in Periodic Potentials. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 94, n. 2, p. 020403, jan. 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.020403>>. Citado na página 17.

ARFKEN, W.; HARRIS. *Mathematical Methods for Physics A comprehensive Guide*. 7. ed. [S.l.]: Elsevier, 2013. ISBN 978-0-12-384654-9. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 26.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. [S.l.: s.n.], 1976. Citado 3 vezes nas páginas 14, 15 e 22.

ASSUNÇÃO, T. F. *Estudo de transporte não recíproco e funções lógicas em cadeias discretas acopladas não linearmente*. Tese (phdthesis) — Universidade federal de Alagoas, dez. 2015. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 35.

- ASSUNÇÃO, T. F.; NASCIMENTO, E. M.; LYRA, M. L. Nonreciprocal transmission through a saturable nonlinear asymmetric dimer. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 90, n. 2, p. 022901, ago. 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.022901>>. Citado na página 34.
- BENJAMIN, T. B.; FEIR, J. E. The disintegration of wave trains on deep water part 1. theory. v. 27, p. 417–430, 1967. ISSN 0022-1120. Citado na página 17.
- BENJAMIN, T. B.; HASSELMANN, K.; LIGHTHILL, M. J. Instability of periodic wavetrains in nonlinear dispersive systems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, Royal Society, v. 299, n. 1456, p. 59–76, jun. 1967. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1967.0123>>. Citado na página 11.
- BESPALOV, V. I.; TALANOV, V. I. Filamentary Structure of Light Beams in Nonlinear Liquids. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, v. 3, p. 307, jun. 1966. ISSN 0021-3640. Disponível em: <<http://adsabs.harvard.edu/abs/1966JETPL...3..307B>>. Citado na página 18.
- BHAT, I. A.; SIVAPRAKASAM, S.; MALOMED, B. A. Modulational instability and soliton generation in chiral Bose-Einstein condensates with zero-energy nonlinearity. *arXiv:2102.09408 [cond-mat]*, fev. 2021. ArXiv: 2102.09408. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2102.09408>>. Citado na página 17.
- BLOCH, F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, v. 52, n. 7, p. 555–600, jul. 1929. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01339455>>. Citado na página 14.
- BOYD, R. W. *Nonlinear Optics*. Burlington, MA: Academic Press, 2008. ISBN 978-0-12-369470-6. Citado 4 vezes nas páginas 16, 17, 21 e 28.
- CAO, P. et al. Gap solitons supported by parity-time-symmetric optical lattices with defocusing saturable nonlinearity. *Optics Communications*, v. 316, p. 190–197, abr. 2014. ISSN 0030-4018. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030401813011589>>. Citado na página 34.
- CHAVES, V. et al. Stability of uniform electronic wavepackets in chains and fullerenes. *International Journal of Modern Physics C*, v. 26, p. 1550133, mar. 2015. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 37.
- COÊLHO, M. B.; DIAS, W. S. Two-particles bounded states as a mechanism to weaken the Anderson localization in systems with structural disorder. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 124, p. 114371, out. 2020. ISSN 1386-9477. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947720306214>>. Citado na página 16.
- COOPER, G. J.; VERNER, J. H. Some Explicit Runge-Kutta Methods of High Order. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 9, n. 3, p. 389–405, 1972. ISSN 0036-1429. Disponível em: <<https://www.jstor.org/stable/2156139>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 37.

DATTA, P. K.; KUNDU, K. Time evolution of models described by one-dimensional discrete nonlinear schrödinger equation. *Physical Review B*, v. 53, n. 22, p. 14929–14936, jun. 1996. ISSN 0163-1829, 1095-3795. ArXiv: cond-mat/9604055. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/9604055>>. Citado na página 23.

DIAS, W. da S. *Propriedades de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade na presença de interação*. Tese (phdthesis) — Universidade Federal de Alagoas, jul. 2011. Citado 6 vezes nas páginas 14, 15, 16, 21, 23 e 37.

DINIZ, L. G. *Efeitos não-adiabáticos em moléculas leves*. Tese (phdthesis) — Universidade Federal de Minas Gerais, abr. 2014. Citado na página 23.

DONG, L. et al. Necklace beams carrying fractional angular momentum in fractional systems with a saturable nonlinearity. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, p. 105840, mar. 2021. ISSN 1007-5704. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1007570421001520>>. Citado na página 35.

EVERITT, P. J. et al. Observation of a modulational instability in Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 96, n. 4, p. 041601, out. 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.041601>>. Citado 4 vezes nas páginas 17, 18, 28 e 29.

FERMI, E. et al. Studies of the nonlinear problems. *Los Alamos: Los Alamos National Laboratory*, 1955. Citado na página 17.

FILHO, V. L. C. *Instabilidade modulacional e auto-armadilhamento em redes não lineares de baixa dimensionalidade*. Tese (Doutorado), jun. 2015. Citado 5 vezes nas páginas 16, 17, 28, 29 e 32.

FILHO, V. L. C.; LIMA, R. P. A.; LYRA, M. L. Interplay between modulational instability and self-trapping of wavepackets in nonlinear discrete lattices. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, American Institute of Physics, v. 25, n. 6, p. 063101, jun. 2015. ISSN 1054-1500. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4921937>>. Citado 12 vezes nas páginas 12, 17, 18, 20, 21, 29, 32, 33, 35, 37, 38 e 39.

FLACH, S.; GORBACH, A. V. Discrete breathers — Advances in theory and applications. *Physics Reports*, v. 467, n. 1, p. 1–116, out. 2008. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157308001580>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 34.

GATZ, S.; HERRMANN, J. Soliton propagation in materials with saturable nonlinearity. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 8, n. 11, p. 2296–2302, nov. 1991. ISSN 1520-8540. Disponível em: <<https://www.osapublishing.org/josab/abstract.cfm?uri=josab-8-11-2296>>. Citado na página 34.

GAUL, C. et al. Stability and decay of Bloch oscillations in the presence of time-dependent nonlinearity. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 84, n. 5, p. 053627, nov. 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.053627>>. Citado na página 17.

GROSS, E. P. Hydrodynamics of a superfluid condensate. v. 4, p. 195–207, 1963. ISSN 0022-2488. Citado 3 vezes nas páginas 17, 21 e 28.

GUZMÁN-SILVA, D. et al. Multi-stable regime and intermediate solutions in a nonlinear saturable coupler. *Physical Review A*, v. 87, n. 4, p. 043837, abr. 2013. ISSN 1050-2947, 1094-1622. ArXiv: 1211.3379. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1211.3379>>. Citado na página 35.

HASEGAWA, A. *Plasma Instabilities and Nonlinear Effects*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1975. (Physics and Chemistry in Space). ISBN 9783642659829. Disponível em: <<https://www.springer.com/gp/book/9783642659829>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 28 e 29.

HASEGAWA, A. Soliton effects in optical waveguides. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 65, n. 6, p. 999–1024, maio 2002. ISSN 0034-4885. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0034-4885/65/6/203>>. Citado na página 17.

HASEGAWA, A.; TAPPERT, F. Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. I. Anomalous dispersion. *Applied Physics Letters*, v. 23, p. 142–144, ago. 1973. ISSN 0003-6951. Disponível em: <<http://adsabs.harvard.edu/abs/1973ApPhL..23..142H>>. Citado 3 vezes nas páginas 21, 28 e 29.

HERRMANN, J. Propagation of ultrashort light pulses in fibers with saturable nonlinearity in the normal-dispersion region. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 8, n. 7, p. 1507–1511, jul. 1991. ISSN 1520-8540. Disponível em: <<https://www.osapublishing.org/josab/abstract.cfm?uri=josab-8-7-1507>>. Citado na página 34.

HICKMANN, J. M. et al. Modulational instability in semiconductor-doped glass fibers with saturable nonlinearity. *Optics Letters*, Optical Society of America, v. 18, n. 3, p. 182–184, fev. 1993. ISSN 1539-4794. Disponível em: <<https://www.osapublishing.org/ol/abstract.cfm?uri=ol-18-3-182>>. Citado 3 vezes nas páginas 34, 36 e 46.

HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. *Annals of Physics*, v. 8, n. 3, p. 325–342, nov. 1959. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491659900028>>. Citado 4 vezes nas páginas 16, 21, 22 e 24.

HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part II. The “small” polaron. *Annals of Physics*, v. 8, n. 3, p. 343–389, nov. 1959. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000349165990003X>>. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 21.

HUBBARD, J.; FLOWERS, B. H. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, Royal Society, v. 276, n. 1365, p. 238–257, nov. 1963. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1963.0204>>. Citado na página 16.

HUBBARD, J.; FLOWERS, B. H. Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, Royal Society, v. 277, n. 1369, p. 237–259, jan. 1964. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1964.0019>>. Citado na página 16.

HUBBARD, J.; FLOWERS, B. H. Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, Royal Society, v. 281, n. 1386, p. 401–419, set. 1964. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1964.0190>>. Citado na página 16.

JOHANSSON, M.; HÖRNQUIST, M.; RIKLUND, R. Effects of nonlinearity on the time evolution of single-site localized states in periodic and aperiodic discrete systems. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 52, n. 1, p. 231–240, jul. 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.231>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 23.

KARTASHOV, Y. V.; MALOMED, B. A.; TORNER, L. Solitons in nonlinear lattices. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 83, n. 1, p. 247–305, abr. 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.83.247>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 34.

KENKRE, V. M.; CAMPBELL, D. K. Self-trapping on a dimer: Time-dependent solutions of a discrete nonlinear Schrödinger equation. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 34, n. 7, p. 4959–4961, out. 1986. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.4959>>. Citado na página 17.

KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. [S.l.]: Guanabara Dois S. A., 1978. Citado na página 21.

KITTEL, C. *Quantum Theory of Solids*. [S.l.: s.n.], 1987. Citado na página 21.

KIVSHAR, Y. S.; PEYRARD, M. Modulational instabilities in discrete lattices. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 46, n. 6, p. 3198–3205, set. 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.46.3198>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 28 e 30.

KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 56, n. 12, p. 1469–1564, dez. 1993. ISSN 0034-4885. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0034-4885/56/12/001>>. Citado na página 37.

LEGGETT, A. J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 73, n. 2, p. 307–356, abr. 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.73.307>>. Citado na página 17.

LEMONS, N. A. *Mecânica Analítica*. 2. ed. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2007. ISBN 85-88325-24-1. Citado na página 28.

LYRA, M. L.; GOUVEIA-NETO, A. S. Saturation effects on modulational instability in non-Kerr-like monomode optical fibers. *Optics Communications*, v. 108, n. 1, p. 117–120, maio 1994. ISSN 0030-4018. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0030401894902259>>. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 35.

MALUCKOV, A. et al. Left-handed metamaterials with saturable nonlinearity. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 77, n. 4, p. 046607, abr. 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.77.046607>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 35.

MARANIAN, P. *Reducing Brittle and Fatigue Failures in Steel Structures*. [S.l.]: American Society of Civil Engineers, 2010. Google-Books-ID: qTT2LgLnPMUC. ISBN 9780784410677. Citado na página 12.

MARQUIÉ, P.; BILBAULT, J. M.; REMOISSENET, M. Nonlinear Schrödinger models and modulational instability in real electrical lattices. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 87, n. 1, p. 371–374, out. 1995. ISSN 0167-2789. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016727899500162W>>. Citado na página 18.

MARQUIÉ, P.; BILBAULT, J. M.; REMOISSENET, M. Observation of nonlinear localized modes in an electrical lattice. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 51, n. 6, p. 6127–6133, jun. 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.51.6127>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.

NGUYEN, J. H. V.; LUO, D.; HULET, R. G. Formation of matter-wave soliton trains by modulational instability. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 356, n. 6336, p. 422–426, abr. 2017. ISSN 0036-8075, 1095-9203. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/356/6336/422>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.

NITHYANANDAN, K. Modulational instability in a twin-core fiber with the effect of saturable nonlinear response and coupling coefficient dispersion. *Physical Review A*, v. 87, n. 4, 2013. Citado na página 34.

OSTROVSKII, L. A.; SOUSTOV, L. V. “Selfmodulation” of electromagnetic waves in nonlinear transmission lines. *Radiophysics and Quantum Electronics*, v. 15, n. 2, p. 182–187, fev. 1972. ISSN 1573-9120. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02209115>>. Citado na página 12.

PAN, Z.; XIONG, S.; GONG, C. Effects of off-diagonal nonlinearity on the time evolution of an initially localized mode. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 56, n. 4, p. 4744–4750, out. 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.56.4744>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 23.

PITAEVSKII, L. P. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Sov. Phys. JETP*, v. 13, n. 2, p. 451–454, 1961. Citado 3 vezes nas páginas 17, 21 e 28.

PRESS SAUL A. TEUKOLSKY, W. T. V. W. H.; FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes in FORTRAN 77 - The Art of Scientific Computing*. 2. ed. Cambridge University Press, 1992. ISBN 0-521-43064-X. Disponível em: <https://websites.pmc.ucsc.edu/~fnimmo/eart290c_17/NumericalRecipesinF77.pdf>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 37.

SALASNICH, L.; PAROLA, A.; REATTO, L. Modulational Instability and Complex Dynamics of Confined Matter-Wave Solitons. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 91, n. 8, p. 080405, ago. 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.080405>>. Citado na página 18.

SAMUELSEN, M. R. et al. Statistical mechanics of a discrete Schrödinger equation with saturable nonlinearity. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 87, n. 4, p. 044901, abr. 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.044901>>. Citado na página 34.

SANTOS, J. L. L. dos; NGUYEN, B. P.; MOURA, F. A. B. F. de. Electronic transport in disordered chains with saturable nonlinearity. *Physica A*, Elsevier (North-Holland), Amsterdam, v. 435, p. 15–21, 2015. ISSN 0378-4371. Citado 6 vezes nas páginas [13](#), [17](#), [20](#), [21](#), [34](#) e [35](#).

SHI, W. et al. Intrinsic Localized Modes in a Nonlinear Electrical Lattice with Saturable Nonlinearity. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 103, n. 3, p. 30006, ago. 2013. ISSN 0295-5075, 1286-4854. ArXiv: 1307.7801. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/1307.7801>. Citado na página [35](#).

SHIVAMOGGI, B. K. Relativistic modulational instability of an electromagnetic wave in a magnetized plasma. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 31, n. 3, p. 1728–1730, mar. 1985. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.31.1728>. Citado 2 vezes nas páginas [17](#) e [28](#).

SILVA, G. L. d. et al. Modulational instability in lossless fibers with saturable delayed nonlinear response. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 26, n. 1, p. 183–188, jan. 2009. ISSN 1520-8540. Disponível em: <https://www.osapublishing.org/josab/abstract.cfm?uri=josab-26-1-183>. Citado 4 vezes nas páginas [28](#), [29](#), [34](#) e [35](#).

Simon, S. H. *The Oxford solid state basics*. [S.l.]: Oxford: Oxford University Press, 2013. xiii + 290 p. ISBN 978-0-19-968077-1/pbk; 978-0-19-968076-4/hbk. Citado na página [21](#).

SOUSA, J. F. A. de. *Instabilidade Modulacional e Auto-armadilhamento em cadeias com interação de longo alcance entre íons*. Tese (Doutorado), 2015. Citado 4 vezes nas páginas [18](#), [21](#), [29](#) e [30](#).

TAI, K.; HASEGAWA, A.; TOMITA, A. Observation of modulational instability in optical fibers. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 56, n. 2, p. 135–138, jan. 1986. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.135>. Citado na página [18](#).

TANIUTI, T.; WASHIMI, H. Self-Trapping and Instability of Hydromagnetic Waves Along the Magnetic Field in a Cold Plasma. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 21, n. 4, p. 209–212, jul. 1968. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.21.209>. Citado na página [17](#).

THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Fifth. [S.l.]: Belmont, CA : Brooks/Cole, 2004. ISBN 0-534-40896-6. Citado na página [16](#).

VALLE, K. N. F. *Métodos Numéricos de Euler e Runge-Kutta*. Monografia (Monografia), 2012. Citado 2 vezes nas páginas [17](#) e [37](#).

WANG, Z. et al. Modulational instability in nonlocal Kerr media with a sine-oscillatory response. *Optics Communications*, v. 394, p. 31–36, jul. 2017. ISSN 0030-4018. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030401817301451>. Citado na página [17](#).

WU, Z. et al. Solitons supported by parity-time-symmetric optical lattices with saturable nonlinearity in fractional Schrödinger equation. *Results in Physics*, v. 19, p. 103381, dez. 2020. ISSN 2211-3797. Disponível em: <http://adsabs.harvard.edu/abs/2020ResPh..1903381W>. Citado na página [35](#).

XIANG, Y. et al. Modulation instability in metamaterials with saturable nonlinearity. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 28, n. 4, p. 908–916, abr. 2011. ISSN 1520-8540. Disponível em: <<https://www.osapublishing.org/josab/abstract.cfm?uri=josab-28-4-908>>. Citado na página 35.

ZAGRYADSKAYA, L. I.; OSTROVSKII, L. A. Observed self-influence of modulated waves in a nonlinear line. *Radiophysics and Quantum Electronics*, v. 11, n. 6, p. 548–550, jun. 1968. ISSN 1573-9120. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01033372>>. Citado na página 12.

ZAKHAROV, V. E.; OSTROVSKY, L. A. Modulation instability: The beginning. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 238, n. 5, p. 540–548, mar. 2009. ISSN 0167-2789. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167278908004223>>. Citado 6 vezes nas páginas 11, 12, 13, 17, 28 e 29.

Apêndices

Apêndice A - Dedução do Teorema de Bloch

Bloch estudou um elétron sujeito a um potencial periódico, de modo que a equação de Schrödinger é satisfeita e podemos escrevê-la:

$$H\psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) \right) = E\psi(\vec{r}, t), \quad (\text{A.1})$$

para um potencial periódico

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}), \quad (\text{A.2})$$

onde $R = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ é um vetor da rede de Bravais. Cada vetor R pode ser visto como uma translação no espaço que deixa a rede invariante. Essa translação pode ser feita usando um operador associado a cada vetor da rede.

Assim, seja $T_{\vec{R}}$ esse operador de translação da rede associado ao vetor da rede de Bravais, \vec{R} , que aplicado em $U(\vec{r})$, translada seu argumento para $U(\vec{r} + \vec{R})$, ou seja, $T_{\vec{R}}U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$.

Devido a periodicidade da rede cristalina, o Hamiltoniano de Bloch

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) \quad (\text{A.3})$$

é o mesmo quando substituimos \vec{r} por $\vec{r} + \vec{R}$, assim:

$$\begin{aligned} T_{\vec{R}}H(\vec{r})\psi(\vec{r}) &= H(\vec{r} + \vec{R})\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \\ &= H(\vec{r})\psi(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r})T_{\vec{R}}\psi(\vec{r}), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

logo,

$$T_{\vec{R}}H(\vec{r}) = H(\vec{r})T_{\vec{R}}. \quad (\text{A.5})$$

Temos ainda que a atuação dessas operadores não dependem da ordem

$$T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}') = T_{\vec{R}'}T_{\vec{R}}\psi(\vec{r}), \quad (\text{A.6})$$

ou seja,

$$T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'} = T_{\vec{R}'}T_{\vec{R}} = T_{\vec{R} + \vec{R}'}. \quad (\text{A.7})$$

Como os operadores H e $T_{\vec{R}}$ comutam,

$$[H, T_{\vec{R}}] = 0, \quad (\text{A.8})$$

podemos escolher autoestados simultâneos para ambos os operadores.

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (\text{A.9})$$

$$T_{\vec{R}}\psi(\vec{r}) = t_{\vec{R}}\psi(\vec{r}), \quad (\text{A.10})$$

onde o autovalor t_a deve satisfazer:

$$T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'}\psi(\vec{R}) = t_{\vec{R}'}T_{\vec{R}}\psi(\vec{r}) = t_{\vec{R}}t_{\vec{R}'}\psi(\vec{r}). \quad (\text{A.11})$$

Temos então que

$$t_{\vec{R}}t_{\vec{R}'} = t_{\vec{R}'}t_{\vec{R}} = t_{\vec{R}'+\vec{R}}, \quad (\text{A.12})$$

que satisfaz:

$$t_{\vec{R}} = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}). \quad (\text{A.13})$$

Portanto, podemos mostrar que os autoestados de H são dados por:

$$T_{\vec{R}}\psi(\vec{R}) = \psi(\vec{r} + \vec{R}) \Rightarrow t_{\vec{R}}\psi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})\psi(\vec{r}), \quad (\text{A.14})$$

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})\psi(\vec{r}). \quad (\text{A.15})$$

Esse resultado é conhecido como Teorema de Bloch.

Apêndice B - Dedução do χ_{IM} com saturação

Para encontrarmos um parâmetro de intensidade não linear analítico acima do qual ocorre instabilidade modulacional (IM), χ_{IM} , para o caso com saturação, partimos da equação de Schrödinger não linear, dada pela expressão

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \chi \frac{|\psi|^2}{1 + \zeta|\psi|^2} \psi, \quad (\text{B.1})$$

onde usando uma solução de onda contínua com uma pequena perturbação, $\epsilon(x, t)$, adicionada na amplitude da solução, obtemos uma expressão para a dinâmica do ruído. A solução é dada por:

$$\psi(x, t) = [\psi_0 + \epsilon(x, t)] e^{i\chi|\psi_0|^2 t}, \quad (\text{B.2})$$

onde temos que $\psi_0 \gg \epsilon(x, t)$ e quando $\epsilon(x, t) = 0$, é solução de (B.1).

A perturbação entra no início da dinâmica, adicionada no instante $t = t_0$, e pode ser causada por agentes externos. Queremos investigar essa dinâmica, para isto substituímos a equação (B.2) em (B.1), e obtemos a expressão:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{i}{\hbar} \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta|\psi_0|^2)} (|\psi_0|^2 + \epsilon(x, t)) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\chi|\psi_0|^2 t}{(1 + \zeta|\psi_0|^2)}} + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\chi|\psi_0|^2 t}{(1 + \zeta|\psi_0|^2)}} \frac{d}{dt} \epsilon(x, t) = \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \epsilon(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\chi|\psi_0|^2 t}{(1 + \zeta|\psi_0|^2)}} \\ -\chi \frac{|\psi_0|^2 + |\psi_0| [\epsilon^*(x, t) + \epsilon(x, t)]}{1 + \zeta (|\psi_0|^2 + |\psi_0| [\epsilon^*(x, t) + \epsilon(x, t)])} (|\psi_0| + \epsilon(x, t)) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\chi|\psi_0|^2 t}{(1 + \zeta|\psi_0|^2)}}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

onde $|\psi|^2 = |\psi_0|^2 + |\psi_0| \epsilon^*(x, t) + \epsilon(x, t)$, pois $|\epsilon(x, t)|^2 \approx 0$. Após organizar a expressão, ficamos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \epsilon(x, t) = \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \epsilon(x, t) - \chi \frac{[|\psi_0|^2 + |\psi_0| (\epsilon^*(x, t) + \epsilon(x, t))] (|\psi_0| + \epsilon(x, t))}{1 + \zeta (|\psi_0|^2 + |\psi_0| [\epsilon^*(x, t) + \epsilon(x, t)])} \\ + \chi \frac{|\psi_0|^2 (|\psi_0| + \epsilon(x, t))}{1 + \zeta|\psi_0|^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde também fatoramos e cancelamos as exponenciais. Tirando o mínimo das parcelas com χ , resolvemos os produtos que aparecem e desprezamos os termos de ordem quadrada

de $\epsilon(x, t)$ no numerador, pois $|\psi_0| \gg \epsilon(x, t)$ e também desprezamos os termos de ordem linear de $\epsilon(x, t)$ no denominador, pelo mesmo motivo. Finalmente, ficamos com:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \epsilon(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \epsilon(x, t) - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} [\epsilon^*(x, t) + \epsilon(x, t)], \quad (\text{B.5})$$

que é a expressão que estávamos procurando.

Tendo em mãos a equação (B.5), usamos uma solução de onda harmônica:

$$\epsilon(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx - \omega t)} \quad (\text{B.6})$$

onde k é o vetor de onda. Faremos procedimento análogo ao feito na seção 2.2. Substituindo (B.6) em (B.5), seremos capazes de compreender a dinâmica do ruído, encontrando a relação de dispersão e avaliando qual o χ crítico para alcançarmos IM. Com a substituição feita, resolvemos a expressão e ficamos com

$$\begin{cases} \left[-\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \right] A - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} B = 0; \\ \left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \right] B - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} A = 0, \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

reescrevendo na forma matricial, temos

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} & \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \\ -\chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} & \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.8})$$

Reescrevemos (B.8) dessa forma porque queremos encontrar a solução não trivial para A e B , de modo que o seu determinante é da forma:

$$\begin{vmatrix} \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} & \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \\ -\chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} & \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{B.9})$$

Assim, obtemos relação de dispersão:

$$\hbar\omega = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - 2\chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} \right)}, \quad (\text{B.10})$$

onde, para que a perturbação não cresça como uma exponencial real, ω deve ser real e, assim, as parcelas entre parênteses devem ser maior ou igual a zero. Dessa forma:

$$k^2 \geq \frac{2m}{\hbar^2} 2\chi \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2}, \quad (\text{B.11})$$

mas como os momentos permitidos pela cadeia é dado pelo intervalo $2\pi/L \geq k \geq 2\pi/a$, com $L = Na$, então

$$\frac{2m}{\hbar^2} 2\chi_{IM} \frac{|\psi_0|^2}{(1 + \zeta |\psi_0|^2)^2} = \frac{4\pi^2}{L^2} = \frac{4\pi^2}{(Na)^2}, \quad (\text{B.12})$$

e, assim

$$\chi_{IM} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{N^2 a^2 2m} \frac{(1 + \zeta|\psi_0|^2)}{|\psi_0|^2}. \quad (\text{B.13})$$

Da expressão acima, assumindo $\hbar^2/2ma^2 = 1$ (termo de *hopping*) e $|\psi_0|^2 1/N$, encontramos a expressão para χ_{IM} que queríamos demonstrar:

$$\chi_{IM} = \frac{2\pi^2}{N} \left(1 + \frac{\zeta}{N}\right)^2 = \frac{2\pi^2}{N} + \frac{4\pi^2}{N^2}, \quad (\text{B.14})$$

onde consideramos apenas os termos lineares de ζ .