

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

ANDRESSA MARIA DA SILVA NUNES

# Efeito Diodo Mediado por um Defeito Não-Hermitiano e Não-Linear

Maceió – Brasil  
2018

ANDRESSA MARIA DA SILVA NUNES

# Efeito Diodo Mediado por um Defeito Não-Hermitiano e Não-Linear

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

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Maceió – Brasil  
2018

**Catálogo na fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**

Bibliotecária Responsável: Janis Christine Angelina Cavalcante – CRB:1664

N972e Nunes, Andressa Maria da Silva.  
Efeito diodo mediado por um defeito não-hermitiano e não-linear / Andressa Maria da Silva Nunes. – 2018.  
123 f. : il.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.  
Tese (Doutorado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física, Maceió, 2018.

Bibliografia: f. 105-110.  
Apêndices: f. 111-123.

1. Física da matéria condensada. 2. Não-hermitiano. 3 Não-linear. 4. Transporte de ondas. I. Título.

CDU: 538.93



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

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

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE**  
**TESE DE DOUTORADO**

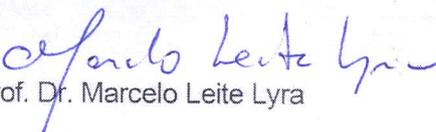
**“Efeito Diodo Mediado por um Defeito Não-Hermitiano e Não-Linear”**

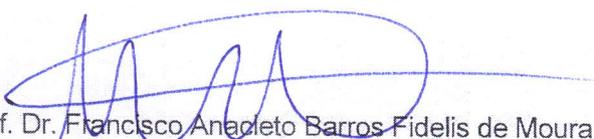
por

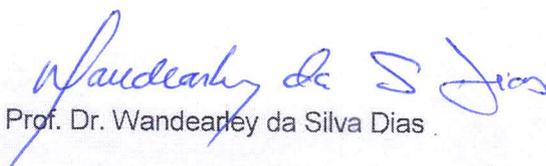
Andressa Maria da Silva Nunes

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Wandearley da Silva Dias, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Fabio Marcel Zanetti, do Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná e Rodrigo André Caetano, consideram a candidata aprovada com grau “A”.

Maceió, 8 de junho de 2018

  
Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

  
Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

  
Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias

  
Prof. Dr. Fabio Marcel Zanetti

  
Prof. Dr. Rodrigo André Caetano

Dedico este trabalho  
aos meus pais, Aldemir e Maria.

# AGRADECIMENTOS

A Deus, que me deu saúde e força para finalizar mais uma etapa da minha vida.

Aos meus pais Maria e Aldemir, pelo amor, educação, incentivo e exemplo. Sem eles nada disso seria possível.

À minha irmã Camila, que em nenhum momento deixou de acreditar em mim.

Ao meu orientador Professor Marcelo Leite Lyra, pela confiança, paciência, compreensão e por tudo que me ensinou.

Ao Professor Fabio Marcel Zanetti, que acompanha meu trabalho desde a graduação.

Agradeço por toda a paciência, dedicação e incentivo.

Aos meus amigos de pós-graduação, em especial: Flavia, Jani, Elenilda, Tasso, Djair e Jefferson, que compartilharam comigo muitos momentos de aprendizado.

A todos os meus professores que direta ou indiretamente contribuíram para a minha formação acadêmica.

À Capes, pelo apoio financeiro.

## RESUMO

Neste trabalho nós estudamos o transporte não-recíproco ao longo de duas cadeias do tipo *tight-binding* que são conectadas por um único defeito que possui acoplamento não-linear e não-hermitiano fora da diagonal. Os espectros de transmissão e reflexão, a curva de ganho e o fator de retificação são obtidos analiticamente usando o método iterativo. Um conjunto de equações de Schrödinger lineares e discretas é usado para modelar a propagação da onda através dos dois lados da cadeia hermitiana, enquanto a equação não-linear e discreta de Ablowitz-Ladik governa seu acoplamento ao defeito. Nós mostramos que o surgimento da janela de multiestabilidade, induzido pela contribuição não-linear, promove uma retificação eficiente da componente da onda transmitida.

**Palavras-chave:** não-hermitiano, não-linear, transporte de ondas, efeito de retificação.

# ABSTRACT

In this work we study the nonreciprocal transport along two tight-binding chains which are connected by a single defect having an asymmetric non-Hermitian nonlinear off-diagonal coupling. The spectrum of transmission and reflection, the gain curve and the rectifying factor are analytically obtained using a backward iterative process. A set of discrete linear Schrödinger equations is used to model the wave propagation through the two Hermitian side chains, while a discrete nonlinear Ablowitz-Ladik equation governs their coupling by the single defect. We show that the emergence of a multistability window induced by the non-linear contribution, together with the biased transport promoted by a parity-breaking non-Hermiticity, generates an efficient rectification of the transmitted wave component.

**keywords:** non-Hermitian, nonlinear, wave transport, rectification effect.

# Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática do funcionamento de um diodo eletrônico. . . .	21
2.1	(a) Curva de dispersão numa rede <i>tight-binding</i> unidimensional. (b) Gráfico da energia $E$ de um elétron numa rede TB unidimensional em função da distância interatômica $a$ . . . . .	31
2.2	Representação esquemática de uma rede cristalina unidimensional com todos os íons iguais e regularmente espaçados. . . . .	33
2.3	Representação esquemática de uma cadeia discreta linear com um defeito central no potencial <i>on-site</i> . . . . .	35
2.4	(a) Espectro de transmissão e (b) reflexão para uma cadeia unidimensional com um defeito no potencial <i>on-site</i> para diferentes valores da energia potencial $V$ e para $ R_0 ^2 = 2.0$ . . . . .	36
2.5	Representação esquemática de uma cadeia discreta unidimensional com defeito central na taxa de <i>hopping</i> . . . . .	37
2.6	(a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão em função do número de onda $k$ para valores distintos do parâmetro $l$ , para uma onda plana inserida numa cadeia unidimensional com um defeito central na taxa de hopping. . . . .	38
2.7	Representação esquemática de uma cadeia discreta unidimensional com potencial tipo-degrau. . . . .	38
2.8	(a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão em função do número de onda da onda incidente $k_1$ para valores distintos de $V$ . . . . .	40

- 2.9 Representação esquemática de uma cadeia de massas-mola acopladas de feito central introduzido por meio de uma massa com valor diferente das demais massas da cadeia. . . . . 40
- 2.10 Representação esquemática de uma cadeia de massas-mola acopladas com um defeito introduzido por meio de uma mola com constante elástica diferente das demais e situada no centro da cadeia. . . . . 42
- 2.11 (a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão para uma onda plana em função de  $k$  para valores distintos de  $m$ , para uma cadeia de massas-mola acopladas e com um defeito central introduzido por meio de uma massa com valor diferente das demais. . . . . 43
- 2.12 (a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão para uma onda plana em função de  $k$  para valores distintos de  $\gamma$ , para uma cadeia de massas-mola acopladas e com um defeito central introduzido por meio de uma mola com valor da constante elástica diferente das demais. . . . . 44
- 3.1 Sistema dextrógiro (RH, right-handed) e levógiro (LH, left-handed). . . . . 50
- 3.2 Níveis de energia do hamiltoniano  $H = \hat{p}^2 - \hat{x}^2 (i\hat{x})^\epsilon$  em função do parâmetro real  $\epsilon$ . . . . . 52
- 3.3 (a) Esquema de uma rede *tight-binding* com *hopping* assimétrico induzido por um campo de calibre imaginário  $h$ . (b) Realização óptica de uma rede não-hermitiana do modelo mostrado em (a) baseado no hopping do fóton acoplado a microanéis ressonadores. (c) Esquema de uma rede dupla homogênea e linear acoplada a uma rede de desordem e que está na presença de um campo de calibre imaginário  $h$ . . . . . 62
- 3.4 Propagação de um pacote de onda gaussiano em uma rede uniforme com desordem (a)  $h = 0$  (rede hermitiana), e (b)  $h = 0.2$ . As energias  $V_n$  são retirados de uma distribuição uniforme na faixa de  $(-2k, 2k)$ . Os painéis superiores referem-se à incidência pelo lado esquerdo, enquanto que os painéis inferiores referem-se à incidência pelo lado direito. . . . . 63

- 3.5 (a) Transmitância espectral  $|t^{(l,r)}(q)|^2$  calculada numericamente e refletância  $|r^{l,r}(q)|^2$  de uma rede dupla homogênea e linear acoplada a uma rede ( $N = 10$ ) e que está na presença de um campo de calibre imaginário, para incidência pela direita e pela esquerda na, na ausência de desordem. (b) As diferentes curvas referem-se a valores crescentes do campo de calibre  $h$ . Curva 1:  $h = 0.2$ ; curva 2:  $h = 1$ ; curva 3:  $h = 1.5$ ; curva 4:  $h = 2.5$ . As curvas tracejadas mostram os comportamentos da transmitância espectral e refletância no limite  $h \rightarrow \infty$ . (b) Comportamento da fase da transmitância espectral  $t^{(l)}(q)$ . . . . . 64
- 3.6 Transmissão espectral  $t(q)$  calculada numericamente (amplitude quadrada e fase) para a incidência do lado esquerdo em uma rede uniforme com desordem da energia on-site nos sites  $-N \leq n \leq N$  com  $N = 20$  para (a)  $h = 0$  (rede hermitiana) e (b) para alguns valores crescentes do campo de calibre  $h$  (curva 1:  $h = 3$ , curva 2:  $h = 5$ , curva 3:  $h = 7$ ). As energias  $V_n$  são tiradas de uma distribuição uniforme na faixa  $(-2k, 2k)$ . O painel (c) mostra a transmissão espectral calculada numericamente (amplitude quadrada e fase) para  $h = 5$  e para 20 realizações diferentes da desordem de rede. . . . . 65
- 3.7 Propagação de um pacote de ondas gaussiano na heteroestrutura com desordem para (a)  $h = 0$  (limite hermitiano), (b)  $h = 0.5$  e (c)  $h = 2$ . As energias  $W_n$  nos sítios  $-N < n < N$  (com  $N = 8$ ) são obtidas da partir de uma distribuição uniforme na faixa  $(-k, k)$ . Os painéis superiores referem-se à incidência pelo lado esquerdo, enquanto que os painéis inferiores à incidência pelo lado direito. . . . . 67
- 3.8 Representação esquemática de uma cadeia de massas-mola acopladas com assimetria introduzida por meio de taxas desiguais para as constantes elásticas entre duas massas localizadas no centro da rede. . . . . 68

- 
- 3.9 Coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . (a) Incidência pelo lado esquerdo; (b) incidência pelo lado direito. Transmissão não-recíproca é alcançada. . . . . 72
- 3.10 Coeficiente de reflexão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . . . . . 73
- 3.11 Intensidade relativa total da onda espalhada (transmitida e refletida) como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$  e  $\gamma = A = 1.0$ . (a) Uma onda plana proveniente do lado esquerdo exibe perda de energia ( $t + r < 1$ ) para uma cadeia de massa-mola com acoplamento não-recíproco. (b) O ganho ( $t + r > 1$ ) ocorre para o caso de incidência pelo lado direito. . . . . 74
- 4.1 Representação esquemática do movimento de cargas em um material dielétrico sujeito a um campo elétrico alternado na frequência de luz visível. O movimento dos íons é insignificante se comparado ao movimento dos elétrons. 77
- 4.2 O efeito de uma dependência não-linear da polarização  $P$  com o campo elétrico  $E$  é mostrada. Para campos pequenos (a)  $P$  não se afasta significativamente de uma dependência linear (linha tracejada). Para campos intensos (b), a polarização tem uma forma de onda distorcida a qual contém componentes significativas nas frequências harmônicas. . . . . 78
- 4.3 Coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  da onda plana incidente para diferentes valores do potencial *on-site*  $V$  e para (a)  $\alpha = 1.0$  esquerdo e (b)  $\alpha = 3.0$ . . . . . 82

- 5.1 Representação esquemática de duas cadeias laterais lineares acopladas por um único sítio defeituoso. Uma onda plana que entra do lado esquerdo é espalhada pelo defeito gerando uma onda refletida e uma transmitida. No presente trabalho, o defeito tem uma não-linearidade não-hermitiana e assimétrica. As setas retas representam uma amplitude de *hopping* unitária. As setas onduladas representam uma contribuição não-linear para o termo de *hopping*, que é mais forte para o lado direito do sítio de defeito. . . . . 86
- 5.2 Espectro do coeficiente de transmissão como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\alpha$ , que controla a não-linearidade, para o caso de um defeito não-linear e não-hermitiano em que a paridade é conservada. As janelas de multiestabilidade surgem regime de  $k$  pequeno e de  $\alpha$  grande. . . . . 88
- 5.3 Coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . (a) Incidência pelo lado esquerdo; (b) incidência pelo lado direito. Note que a janela de multiestabilidade persiste para o caso de incidência pela direita (b) e desaparece com o aumento da assimetria para uma onda incidindo pelo lado oposto (a). Transmissão não-recíproca é alcançada, especialmente na região de multiestabilidade. . . . . 90
- 5.4 Coeficiente de reflexão como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . (a) Incidência do lado esquerdo; (b) Incidência do lado direito. Os modos extras na janela de multiestabilidade possuem coeficientes de reflexão que se aproximam da unidade para a incidência do lado esquerdo. A reflexão não-recíproca também é alcançada, mas em menor grau do que o exibido pelo componente de onda transmitida (ver Figura 5.3). . . . . 91

- 5.5 Intensidade relativa total da onda espalhada (transmitida e refletida) como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$  e  $\alpha = -V = 3.0$ . (a) Uma onda plana proveniente do lado esquerdo exibe perda de energia ( $t + r < 1$ ) para acoplamentos não-hermitianos. (b) O ganho de potência ocorre para o caso de incidência do lado direito. . . . . 92
- 5.6 Evolução temporal de um pacote de ondas Gaussiano viajando para o sítio do defeito não-linear não-hermitiano localizado em  $n = 1$ . Painel superior: incidência pelo lado esquerdo. Painel inferior: incidência pelo lado direito. Uma transmissão não-recíproca significativa é conseguida com um grau mais alto para a incidência através do lado direito. Os parâmetros são  $V = -3.0$ ,  $\alpha = 3.0$ ,  $\epsilon = 0.5$ ,  $A = 0.6$ ,  $\sigma = 5.0$ ,  $n_0 = \pm 60$  e  $k = \pm\pi/2$ . . . . . 93
- 5.7 Coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda para uma onda plana incidindo pelo lado (a) esquerdo e (b) direito. Aqui consideramos alguns casos em que  $\varepsilon > 1.0$ . Para a incidência pelo lado direito a reflexão é predominante maior que a unidade. . . . . 94
- 5.8 Intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito. . . . . 95
- 5.9 Gráfico do coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  da onda incidente quando a não-linearidade do sistema é fraca ( $\alpha = 1.0$ ), para diferentes valores da assimetria ( $\varepsilon$ ) e para uma onda introduzida na cadeia pelo lado esquerdo (a) e pelo lado direito (b). . . . . 96
- 5.10 Intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito e para  $\alpha = 1.0$ . . . . . 97
- 5.11 Gráfico do coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  da onda incidente quando a não-linearidade do sistema é forte ( $\alpha = 5.0$ ), para diferentes valores da assimetria ( $\varepsilon$ ) e para uma onda introduzida na cadeia pelo lado esquerdo (a) e pelo lado direito (b). . . . . 98

- 
- 5.12 Intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito e para  $\alpha = 5.0$ . . . . . 99
- 5.13 Fator de retificação para transmissão  $f_t$  como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . Diferentes valores do parâmetro  $\alpha$  que controla a não-linearidade foram considerados [(a)  $\alpha = 1.0$ , (b)  $\alpha = 3.0$  e (c)  $\alpha = 5.0$ ]. A retificação eficiente é alcançada no regime de grande não-linearidade e assimetria. . . . . 100
- 5.14 Fator de retificação  $f_r$  para o coeficiente de reflexão como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . Valores distintos do parâmetro de não-linearidade  $\alpha$  foram considerados [(a)  $\alpha = 1.0$ ; (b)  $\alpha = 3.0$  e (c)  $\alpha = 5.0$ ]. A retificação relativamente eficiente é restrita a regiões estreitas espectrais no regime de defeito fortemente não-linear, mas não assimétrico e não-hermitiano. . . . . 101

# SUMÁRIO

<b>FICHA</b> . . . . .	<b>2</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>18</b>
1.1 Transporte Unidirecional . . . . .	19
1.2 Diodos . . . . .	20
1.2.1 Diodo Eletrônico . . . . .	20
1.2.2 Diodo Óptico . . . . .	22
1.3 Objetivos e Organização da Tese . . . . .	22
<b>2 MODELO TIGHT-BINDING DE CADEIAS DISCRETAS</b> . . . . .	<b>24</b>
2.1 Redes Cristalinas . . . . .	24
2.1.1 Rede de Bravais e O Potencial Periódico . . . . .	25
2.2 Teorema de Bloch . . . . .	26
2.2.1 A condição de contorno de Born-Von Karman . . . . .	27
2.3 Aproximação Tight-Binding . . . . .	28
2.3.1 Funções de Wannier . . . . .	30
2.4 Alguns Exemplos . . . . .	32
2.4.1 Rede Cristalina Pura e Unidimensional . . . . .	32
2.4.2 Rede Cristalina Unidimensional com Defeito no Potencial <b>On-site</b> . . . . .	34
2.4.3 Rede Cristalina Unidimensional com Defeito no <b>Hopping</b> . . . . .	36
2.4.4 Rede Cristalina Unidimensional Tipo-Degrau . . . . .	38
2.4.5 Análogo Clássico: Cadeia de Massa-Mola Acopladas . . . . .	40

---

<b>3</b>	<b>MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-HERMITIANA</b> . . . . .	<b>45</b>
3.1	Hamiltonianos Não-Hermitianos . . . . .	46
3.2	Uma Breve Revisão Bibliográfica . . . . .	47
3.3	Mecânica Quântica Não-Hermitiana $\mathcal{PT}$ -simétrica . . . . .	49
3.4	Comparação das Teorias Quânticas Hermitiana e $\mathcal{PT}$ -simétrica . . . . .	55
3.4.1	Teoria Quântica Hermitiana . . . . .	55
3.4.2	Teoria Quântica $\mathcal{PT}$ -simétrica . . . . .	57
3.5	Algumas Aplicações da Mecânica Quântica Não-Hermitiana . . . . .	61
3.5.1	Cadeias Lineares com Taxas de Hopping Assimétricas . . . . .	61
3.5.2	Análogo Clássico: Cadeia de Massa-Mola Acopladas com Interação Não- Recíproca . . . . .	68
<b>4</b>	<b>NÃO-LINEARIDADE</b> . . . . .	<b>75</b>
4.1	Não-Linearidade em Sistemas Ópticos . . . . .	76
4.2	Não-Linearidade em Sistemas Eletrônicos . . . . .	78
4.2.1	Equação Discreta Não-linear de Schrödinger . . . . .	80
4.2.2	Influência da Não-Linearidade no Transporte Eletrônico em Cadeias Unidi- mensionais . . . . .	81
<b>5</b>	<b>TRANSPORTE NÃO-RECÍPROCO EM UMA CADEIA COM DEFEITO NÃO-HERMITIANO E NÃO-LINEAR</b> . . . . .	<b>84</b>
5.1	Desenvolvimento Analítico do Método . . . . .	84
5.2	Transporte Não-Recíproco . . . . .	89
5.2.1	Análise para $\alpha =  V $ . . . . .	89
5.2.2	Análise para $\alpha <  V $ . . . . .	95
5.2.3	Análise para $\alpha >  V $ . . . . .	97
5.2.4	Estudo das Propriedades de Transmissão via Fator de Retificação . . . . .	98
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b> . . . . .	<b>102</b>
<b>7</b>	<b>APÊNDICE</b> . . . . .	<b>110</b>

---

---

A. Prova do Teorema de Bloch . . . . .	110
B. Os Postulados da Mecânica Quântica . . . . .	113
C. Artigo Publicado . . . . .	116

# 1

## INTRODUÇÃO

O estudo de fenômenos de transporte em meios estruturados continua sendo de grande interesse de toda a comunidade acadêmica, devido às inúmeras aplicações possíveis nas mais diversas áreas, culminando na construção de dispositivos com dimensões cada vez menores e que procuram aumentar a velocidade no transporte. Dentro desse cenário, destacamos a importância do desenvolvimento de dispositivos nano e mesoscópicos que operem de maneira não-recíproca. Esses tipos de sistemas constituem a base da computação quântica, como exemplo, podemos citar os diodos, transistores, complexadores e portas-lógicas (ZHAO et al., 2016; ASSUNÇÃO et al., 2010; QI et al., 2011). Em óptica, por exemplo, o transporte não-recíproco pode ser obtido através do efeito Faraday (SKLAN, 2015), onde um campo magnético externo é usado para quebrar a simetria do espaço-tempo. Podemos ainda citar outros exemplos de efeitos que geram um comportamento assimétrico no sistema como os efeitos Hall-quântico (PRANGE et al., 1986; TSUI et al., 1982; KONIG et al., 2007) e Cotton-Mouton (SKLAN, 2015). Nas últimas décadas, vários avanços foram apresentados em uma grande variedade de sistemas Hall-quânticos, supercondutores topológicos, diodos e isoladores (ZHAO et al., 2016; ASSUNÇÃO et al., 2010; QI et al., 2011) com aplicações, principalmente, em spintrônica. No entanto, o transporte não-recíproco via efeito Hall-quântico não surge em sistemas unidimensionais. E com isso, surge a necessidade de explorar novas formas de induzir um comportamento não-recíproco, principalmente em sistemas unidimensionais.

## 1.1 Transporte Unidirecional

Nelson e Hatano foram pioneiros no estudo da localização de Anderson em redes unidimensionais desordenadas não-hermitianas (HATANO, NELSON; 1996). A não-hermiticidade foi introduzida no sistema como resultado da presença de um campo de calibre imaginário que atuava nos sítios da rede. Eles mostraram que a presença da não-hermiticidade pode impedir a localização de Anderson. Esse fenômeno, conhecido como delocalização não-hermitiana, foi estudado e revisado por vários autores (MOISEYEV, 1998; BENDER, 2007; MUGA et al., 2004; LONGHI, 2016). A implementação de um campo de calibre imaginário ainda é um desafio no contexto da física da matéria condensada. No entanto, em dispositivos ópticos, isso pode ser simulado usando uma sequência de microanéis ressonadores (LONGHI et al., 2015).

Motivados pelo fenômeno da delocalização não-hermitiana, alguns trabalhos recentes exploraram as propriedades de transporte em redes unidimensionais não-hermitianas (LONGHI et al., 2015). Foi verificado que, nestes modelos, a onda propagante é amplificada em uma direção e amortecida na direção oposta, levando assim, a um efeito tipo diodo. As redes do tipo *tight-binding* têm sido amplamente utilizadas em vários trabalhos que exploram propriedades de transporte (PELINOVSKY et al., 2013; ZNOJIL, 2007), devido a sua versatilidade, fácil implementação experimental e a possibilidade de obter resultados exatos (EICHELKRAUT et al., 2013). Em geral, a não-hermiticidade pode ser introduzida pela presença de um campo de calibre imaginário, energia potencial *on-site* complexa ou taxas de *hopping* assimétricas (PELINOVSKY et al., 2013).

O transporte não-recíproco também pode ser alcançado devido à presença de contribuições não-lineares em sistemas com simetria de paridade quebrada (FEISE et al., 2005; TOCCI et al., 1995; CASATI, LEPRI; 2011). Nas estruturas eletrônicas, os efeitos não-lineares resultam do forte acoplamento eletro-fônon subjacente. Esse acoplamento pode promover o surgimento de uma transição metal-isolante (LYRA et al., 2009; MISHCHENKO et al., 2004), que pode ser explorada em propostas de novos dispositivos de comutação (WANG et al., 2015; ASSUNÇÃO et al. 2016). Nos sistemas ópticos, os termos não-lineares originam-se de contribuições não-lineares de alta ordem para o índice de

refração devido à presença de um forte campo elétrico em meios dielétricos.

## 1.2 Diodos

Um dos maiores desafios enfrentados pela engenharia quântica não é apenas a fabricação de dispositivos de tamanho micro e nano, mas também projetá-los corretamente para que possam exibir as características exatas para os quais são destinados, tais como a capacidade de controlar o fluxo de energia. Dentre essa classe de dispositivos destacamos os diodos. Por serem o elemento base da computação quântica e de diversos outros dispositivos, eles estão presentes também em diversas outras áreas, como acústica, eletrônica e óptica.

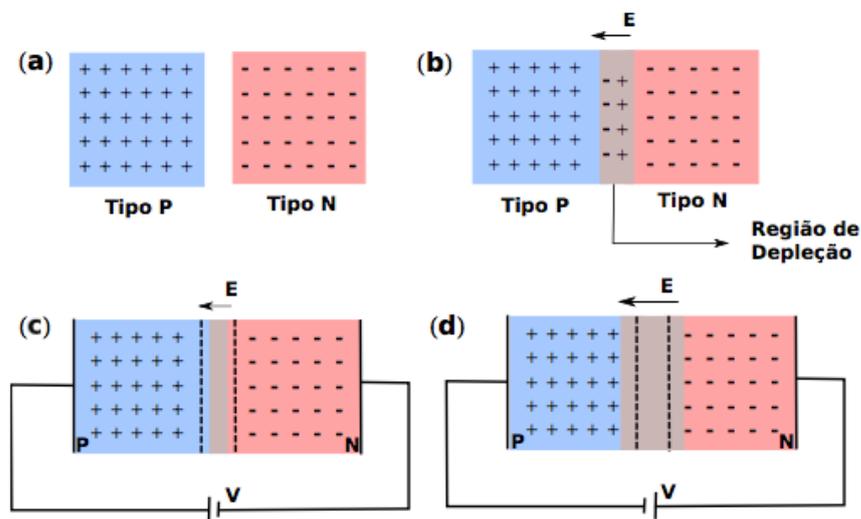
Diodo é um dispositivo cuja finalidade consiste em transmitir energia de maneira não-recíproca. O primeiro diodo foi construído no campo da eletrônica. Este controlava o fluxo de corrente elétrica a partir da união de dois semicondutores dopados de maneira diferentes. O papel do diodo foi fundamental para o desenvolvimento da eletrônica. Diante disso, a comunidade científica tem buscado análogos do diodo eletrônico em diversas outras áreas, bem como explorado suas propriedades. No entanto, o grande desafio enfrentado pelos cientistas é a obtenção de maneiras de quebrar a simetria dos sistemas, de modo que eles operem de maneira não-recíproca e obedeçam às necessidades de cada área. Vários trabalhos surgiram nas últimas décadas com o objetivo de estudar o transporte assimétrico em diferentes geometrias e com maneiras distintas de quebrar a simetria do sistema (LIRA et al., 2012; LI et al., 2014; CASATI, LEPRI; 2011).

A seguir estudaremos de modo mais detalhado os diodo eletrônicos e ópticos, para mais detalhes acerca de outros tipos de diodo (acústico, térmico), o leitor pode consultar (CHANG et al., 2006; WANG et al., 2014; LIANG et al., 2015; BOECHLER et al., 2011; MAZNEV et al, 2013).

### 1.2.1 Diodo Eletrônico

Como mencionado acima, o primeiro diodo desenvolvido foi o eletrônico. Ele tem como característica a dependência da transmissão com a direção de propagação. Esse

Figura 1.1: Representação esquemática do funcionamento de um diodo eletrônico.



Fonte: Assunção, 2015.

tipo de dispositivo pode comportar-se como condutor numa direção, e não condutor (ou menos condutor) na direção contrária.

O diodo eletrônico mais conhecido é o que controla o fluxo de corrente elétrica. Ele se comporta como condutor numa direção e isolante na direção oposta, a depender da diferença de potencial a qual está submetido. Ele é composto por dois semicondutores: um carregado positivamente (tipo P) e outro carregado negativamente (tipo N), veja Figura 1.1. Na região em que os semicondutores se unem, há uma combinação entre os portadores de cargas positivas e negativas, de modo que não há cargas livres nessa região. Essa região é denominada de região de depleção. Quando aplicamos uma polarização direta na região de depleção, diminuímos sua extensão. Como consequência, temos que os portadores de cargas têm agora energia suficiente para atravessá-la e há, portanto, a passagem de corrente elétrica pelo diodo. No entanto, se a polarização aplicada é inversa, a região de depleção aumenta, pois os polos atraem as cargas livres de cada lado da junção. Consequentemente a corrente que passa através do diodo neste caso é nula ou praticamente nula.

## 1.2.2 Diodo Óptico

Os diodos ópticos são dispositivos fundamentais na área de comunicação óptica. Existem várias maneiras de obter o efeito diodo em sistemas ópticos, as mais difundidas são: por meio da quebra da simetria de reversão temporal devido à presença de um campo magnético ou explorando as interações não-lineares do sistema.

Um tipo de diodo óptico bastante estudado consiste na combinação de cristais fotônicos (CF) assimétricos e não-linearidade. Os CF mais comuns são compostos por estruturas formadas pela superposição de finas camadas feitas de materiais dielétricos distintos (JOANNOPOULOS et al., 1997). Essa combinação permite o controle sobre a propagação e confinamento de ondas eletromagnéticas em determinadas direções e frequências. A vantagem no uso dos CF para operarem como diodos, consiste no fato de que ele possui alta capacidade de transmissão unidirecional, que pode ser obtida de maneira controlada por meio da assimetria no arranjo das camadas que o compõe e do fator que controla a não-linearidade. Além disso, eles são sistemas simples de serem modelados e fabricados (NASCIMENTO, 2009; JAMSHIDI-GHALEH et al., 2015; MELLO e TOMSOVIC, 1992; LI; ZHANG, 1998; KWAN et al., 2003).

## 1.3 Objetivos e Organização da Tese

No presente trabalho, investigaremos a possibilidade de obter transporte não-recíproco em sistemas em que a não-hermiticidade é induzida por meio de uma contribuição não-linear fora da diagonal na dinâmica de propagação da onda. Em particular, consideraremos o transporte de ondas harmônicas ao longo de duas cadeias hermitianas do tipo *tight-binding*, que estão conectadas por um único defeito com um acoplamento assimétrico não-linear fora da diagonal. A não-hermiticidade será introduzida por taxas de *hopping* não-lineares no sítio de defeito para primeiros vizinhos. Além disso, consideraremos que esses termos não-lineares são assimétricos para quebrar a simetria de paridade e promover um transporte de ondas não-recíproco. A região de acoplamento das redes hermitianas ao defeito será modelada por uma equação discreta de Ablowitz-Ladik. Exploraremos a influência da resposta não-linear e a presença da não-hermiticidade no fenômeno de

multiestabilidade e o comportamento não-recíproco resultante.

O trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2, realizaremos uma revisão teórica do estudo das propriedades de transporte em sólidos cristalinos. Já no capítulo 3, será apresentada uma revisão bibliográfica acerca dos primeiros trabalhos que estudaram sistemas quânticos não-hermitianos. Será mostrado ainda a formulação da mecânica quântica não-hermitiana  $\mathcal{PT}$ -simétrica, e por fim, apresentaremos algumas aplicações de hamiltonianos não-hermitianos em trabalhos que estudam fenômenos de transporte. No capítulo 4, será apresentado um estudo sobre não-linearidade e seu impacto nos fenômenos de transporte. No capítulo 5, vamos apresentar o sistema investigado e descrever a metodologia utilizada para calcular os coeficientes de transmissão e refração. O espectro completo do coeficiente de transmissão será obtido analiticamente a partir do método iterativo. Será fornecida uma análise detalhada do espectro de transmissão para regimes distintos da não-linearidade e assimetria, com especial atenção para o desenvolvimento do comportamento multiestável e seu impacto no transporte não-recíproco. No capítulo 6, resumimos nosso trabalho, extraímos nossas principais conclusões e discutimos sobre as perspectivas futuras.

## 2

# MODELO TIGHT-BINDING DE CADEIAS DISCRETAS

O estudo das propriedades de transporte eletrônico em sólidos sempre foi de grande importância, principalmente em Física da Matéria Condensada, tanto do ponto de vista teórico, como devido à gama de aplicabilidades tecnológicas.

No início do século XX foram realizados os primeiros estudos sobre as propriedades eletrônicas dos cristais. No entanto, tais estudos consideravam que os sólidos cristalinos eram periódicos e homogêneos, o que está bem distante dos sólidos reais (ASHCROFT e MERMIN, 1976; KITTEL, 2005). Dessa forma, durante o último século, os físicos tentaram construir modelos simples que esclarecessem de modo qualitativo e quantitativo as propriedades de transporte nesses materiais. Foram desenvolvidos alguns modelos bem-sucedidos que incorporam efeitos de desordem e interações não-lineares.

Ao longo deste capítulo, apresentaremos uma revisão teórica do estudo das propriedades de transporte em meios cristalinos e dos efeitos que surgem ao incluir imperfeições. A formulação matemática mostrada nesse capítulo servirá de base para os resultados apresentados no capítulo 5.

## 2.1 Redes Cristalinas

A cristalinidade de um material não é definida a partir de sua aparência macroscópica, mas pelo fato de os íons estarem organizados de forma periódica na escala microscópica. A relação entre essa periodicidade microscópica e a regularidade geométrica de

cristais macroscópicos foi exaustivamente estudada e comprovada em 1913 por W. e L. Bragg em seu trabalho de cristalografia por raios X (ASHCROFT e MERMIN, 1976;).

Para o estudo das propriedades de transporte eletrônico é necessário o conhecimento de alguns conceitos fundamentais de física do estado sólido, que serão apresentados a seguir.

### 2.1.1 Rede de Bravais e O Potencial Periódico

A rede de Bravais é um conceito fundamental na descrição de qualquer sólido cristalino, pois ela especifica o arranjo periódico no qual as unidades repetidas do cristal estão ordenadas. A rede de Bravais provê apenas a geometria do arranjo periódico, sem se importar com as unidades que o constituem. Tais unidades podem ser átomos, conjunto de átomos, íons, dentre outros.

Os íons em um cristal perfeito possuem configuração espacial periódica e regular. Considerando o caso de um único elétron neste tipo de cristal, devemos então considerar um potencial periódico  $U(\vec{r})$  com a periodicidade da rede de Bravais, logo:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}) \quad (2.1)$$

para todos os vetores  $\vec{R}$  da rede de Bravais.

Já que a escala de periodicidade do potencial  $U(10^{-8}cm)$  mede o comprimento de onda de De Broglie para um único elétron no modelo do elétron livre de Sommerfeld (ASHCROFT e MERMIN, 1976), torna-se essencial empregarmos a mecânica quântica para estudarmos o efeito da periodicidade no movimento do elétron.

Vale salientar que a periodicidade perfeita é uma idealização, os sólidos reais estão longe de serem absolutamente puros. Há também o efeito da temperatura que deve ser levado em consideração, pois os íons sofrem vibrações térmicas de maneira contínua em torno da sua posição de equilíbrio.

Todas essas imperfeições produzem efeitos muito importantes. Por exemplo, elas são responsáveis pelo fato de que a condutividade elétrica dos materiais não pode ser infinita (ASHCROFT e MERMIN, 1976).

Dividiremos nosso problema em duas partes: (a) o cristal perfeito e ideal, no qual o potencial é perfeitamente periódico; (b) todos os outros defeitos descritos acima presentes em um cristal real serão considerados como uma perturbação no cristal fictício perfeito.

## 2.2 Teorema de Bloch

**Teorema** - Os autoestados  $\psi$  da Hamiltoniana monoelétrica  $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})$ , onde  $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$  para todo  $\vec{R}$  em uma rede de Bravais, podem assumir a forma de uma onda plana, com vetor de onda  $\vec{k}$ , vezes uma função de periodicidade da rede de Bravais:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.2)$$

sendo

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.3)$$

O número  $n$  é o chamado índice de banda. Diferentemente do que ocorre com um elétron livre, para um elétron de Bloch,  $\psi$  não é um autoestado do operador momento linear  $\hat{P}$ . Logo, o momento linear não é identificado apenas como  $\hbar\vec{k}$ , ele também vai depender da função de periodicidade da rede. Isto ocorre porque a função de periodicidade da rede quebra a simetria de translação completa do espaço. Tal resultado pode ser verificado se aplicarmos  $\hat{P}$  na função de onda de Bloch:

$$\begin{aligned} \hat{P}\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) &= -i\hbar\vec{\nabla} \left[ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\ &= \hbar\vec{k}\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) - i\hbar e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\nabla} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Note que, as Eqs. (2.2) e (2.3), implicam que

$$\begin{aligned} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) &= e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

O teorema de Bloch é, às vezes, expresso na forma alternativa mostrada acima. A prova do Teorema de Bloch pode ser verificada no Apêndice A.

### 2.2.1 A condição de contorno de Born-Von Karman

Quando impomos uma condição de contorno apropriada para as funções de onda, podemos demonstrar que o vetor de onda deve ser real e chegamos a uma condição que restringe os valores permitidos de  $k$ . Para obtermos tal condição é conveniente trabalhar em um volume proporcional a uma célula primitiva da rede de Bravais. Com isso, usamos a chamada condição de contorno periódica de Born-Von Karman para uma rede de Bravais que é dada por:

$$\psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.6)$$

sendo  $\vec{a}$  os três vetores primitivos da rede de Bravais e  $N_i$  todos os números inteiros de ordem  $N^{1/3}$ , onde  $N = N_1 N_2 N_3$  é o número total de células primitivas no cristal.

Tal condição de contorno pode ser adotada se considerarmos que as propriedades internas do sólido não dependerão da escolha da condição de contorno, por conveniência analítica.

Aplicando o teorema de Bloch à condição de contorno 2.6, obtemos:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = e^{iN_i \vec{k} \cdot \vec{a}_i} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.7)$$

que requer

$$e^{iN_i \vec{k} \cdot \vec{a}_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.8)$$

Como  $k$  é dado por  $\vec{k} = x_1 \vec{b}_1 + x_2 \vec{b}_2 + x_3 \vec{b}_3$ , temos que

$$e^{2\pi i N_i x_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.9)$$

Usando a relação de Euler, é fácil mostrar que:

$$x_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad m_i \text{ inteiro.} \quad (2.10)$$

Portanto, a forma geral dos vetores de onda de Bloch permitidos é

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i, \quad m_i \text{ inteiro.} \quad (2.11)$$

## 2.3 Aproximação Tight-Binding

Na maioria dos sistemas físicos reais, o potencial cristalino não é suficientemente fraco para ser considerado apenas uma perturbação ao problema do cristal perfeito. Nessas situações é mais conveniente escrever o estado de Bloch como uma combinação linear dos orbitais atômicos, essa abordagem é conhecida como aproximação *tight-binding* (TB). Estas são soluções da equação de Schrödinger para o caso de átomos isolados. Dessa forma, partimos da premissa de que os orbitais atômicos podem fornecer uma boa descrição para estados eletrônicos que estão fortemente ligados a seus átomos de origem. O potencial dos demais íons pode ser considerado uma perturbação. Portanto, a aproximação TB é usada para elétrons fortemente ligados, como o próprio nome sugere.

Por simplicidade, vamos considerar um cristal monoatômico (cristal de átomos de hidrogênio).

Escrevendo a função de Bloch como uma combinação linear de orbitais atômicos, temos:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R}), \quad (2.12)$$

sendo  $\vec{k}$  o vetor de onda. Os termos  $1/\sqrt{N}$  e  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$  surgem para que a função de onda satisfaça o teorema de Bloch e seja normalizada.

O hamiltoniano do elétron no cristal pode ser escrito como a soma do hamiltoniano de um único átomo ( $H_{at}$ ) e outra parte que contém todas as correções ao potencial atômico exigidas para se produzir o potencial periódico completo do cristal ( $H_{cristal}$ )

$$H = H_{at} + H_{cristal}. \quad (2.13)$$

Na aproximação *tight-binding*, como discutido acima, consideramos que  $H_{at} \gg H_{cristal}$ . Logo, a energia total do elétron é  $E_k = \varepsilon_0 + E_{cristal}$ , com  $\varepsilon_0$  sendo a energia do átomo isolado e  $E_{cristal}$  a energia proveniente da superposição das funções de onda localizadas nos demais sítios atômicos. Seja  $\phi(\vec{r})$  o autoestado de um único elétron em um átomo isolado, com autoenergia  $\varepsilon_0$ , podemos então escrever:

$$H_{at}\phi(\vec{r}) = \varepsilon_0\phi(\vec{r}) \quad (2.14)$$

Nosso intuito agora é saber como  $H_{crystal}$  altera as energias  $\varepsilon_0$  do elétron no átomo. Para isso, calculamos o valor esperado de  $H_{crystal}$  usando as funções de onda  $\psi_k(\vec{r})$  (Eq. 2.12), logo:

$$\begin{aligned} E_{crystal} &= \langle \psi_k^* | H_{crystal} | \psi_k \rangle = \int \psi_k(\vec{r})^* H_{crystal} \psi_k(\vec{r}) d^3r \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}') H_{crystal} \phi(\vec{r} - \vec{R}) d^3r. \end{aligned} \quad (2.15)$$

A energia total do elétron será  $E_k = \varepsilon_0 + E_{crystal}$ . Como, na aproximação *tight-binding*, assumimos que a superposição dos orbitais é muito pequena, de modo que só se estende aos primeiros vizinhos, podemos reescrever a soma dupla da equação acima, como:

$$E_{crystal} = \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}) H_{crystal} \phi(\vec{r} - \vec{R}) d^3r + \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}') H_{crystal} \phi(\vec{r} - \vec{R}) d^3r. \quad (2.16)$$

Sendo  $\vec{a}$  um vetor da Rede de Bravais, podemos escrever de modo alternativo:

$$E_{crystal} = -\alpha - \gamma \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}}, \quad (2.17)$$

sendo

$$\alpha \equiv \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}) H_{crystal} \phi(\vec{r} - \vec{R}) d^3r, \quad (2.18)$$

e

$$\gamma \equiv \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}') H_{crystal} \phi(\vec{r} - \vec{R}) d^3r. \quad (2.19)$$

Note que o termo  $\alpha$  é justamente o valor esperado de  $H_{crystal}$  no sítio atômico e representa a correção perturbativa de primeira ordem na energia do elétron em relação ao átomo isolado. Já  $\gamma$  corresponde à superposição das funções de onda de átomos vizinhos. Em física do estado sólido essa integral é conhecida como termo de *hopping* e está associada à energia do salto do elétron de um ponto a outro da rede cristalina. Como pode ser observado nas equações acima, o cálculo dos termos  $\alpha$  e  $\gamma$  depende do conhecimento

detalhado de  $H_{crystal}$ , ou seja, depende do sistema que está sendo estudado. Dessa maneira,  $\alpha$  e  $\gamma$ , são considerados parâmetros, a serem ajustados de acordo com o problema em questão.

Portanto, a energia total do elétron será:

$$E_k = \varepsilon_0 - \alpha - \gamma \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}. \quad (2.20)$$

Para exemplificar o que foi descrito acima, vamos aplicar a Eq. (2.17) a um exemplo simples, o caso de um elétron em um cristal unidimensional. Vamos assumir que a distância interatômica é  $a$ . Então, os vetores de translação podem ser escritos como  $\vec{R} = na\hat{i}$ , sendo  $n$  um número inteiro e  $\hat{i}$  o vetor unitário na direção  $x$ . Para a translação de primeiros vizinhos, temos apenas dois vetores  $\vec{R} = \pm a\hat{i}$ . Logo, a Eq. (2.17) para o caso de um cristal unidimensional é:

$$\begin{aligned} E_k &= \varepsilon_0 - \alpha - \gamma(e^{ika} + e^{-ika}) \\ &= \varepsilon_0 - \alpha - 2\gamma \cos(ka). \end{aligned} \quad (2.21)$$

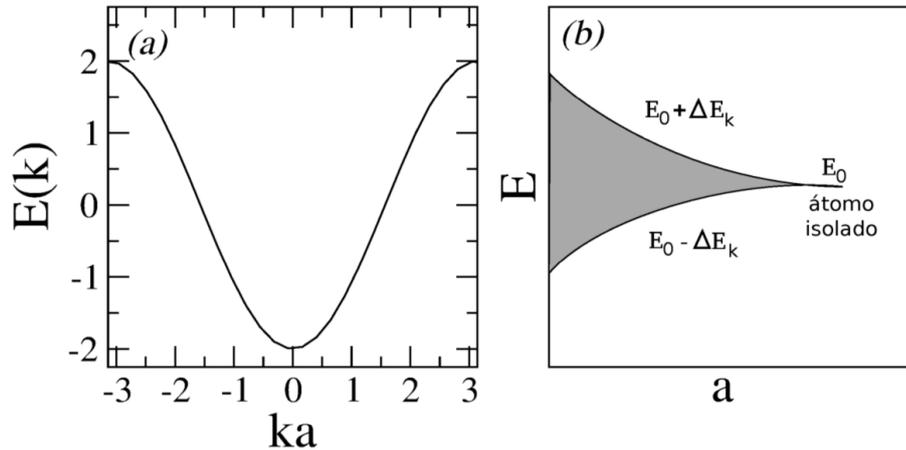
A Figura 2.1 mostra o comportamento da relação de dispersão para o caso de um cristal unidimensional (Eq. (2.21)). Observe que a largura da banda de energia é  $4\gamma$  e o valor mínimo da energia do elétron ocorre quando  $k = 0$ , já o máximo valor é obtido para  $k = \pm\pi/a$ , ou seja, nos limites da primeira zona de Brillouin.

Apesar da função de onda da aproximação TB ser escrita como uma combinação linear de orbitais localizados, a probabilidade de encontrar um elétron, descrito por esta função de onda, é a mesma para qualquer sítio da rede. Vimos, através da Eq. (2.17), que a largura da banda de energia é proporcional à superposição dos orbitais atômicos ( $\gamma$ ). Desse modo, quanto maior a superposição dos orbitais atômicos (ou seja, quanto maior for  $\gamma$ ), maior será a taxa de tunelamento eletrônico, e portanto a velocidade do elétron.

### 2.3.1 Funções de Wannier

Na seção anterior vimos que as funções de Bloch, para qualquer banda, podem ser escritas na forma (2.12), que é justamente a premissa da aproximação *tight-binding*. As funções  $\phi_n$  da Eq. (2.12), que têm o papel de funções de onda atômicas, são conhecidas

Figura 2.1: (a) Curva de dispersão numa rede *tight-binding* unidimensional. (b) Gráfico da energia  $E$  de um elétron numa rede TB unidimensional em função da distância interatômica  $a$ .



Fonte: Dias, 2016.

como funções de Wannier (ASHCROFT e MERMIN, 1976). Essas funções podem ser definidas para qualquer banda, mas estão melhor descritas na aproximação TB.

Para mostrarmos que qualquer função de Bloch  $\psi_{n\vec{k}}$  pode ser escrita na forma (2.12), partimos do fato de que para um dado  $\vec{k}$  e  $\vec{r}$  fixo,  $\psi_{n\vec{k}}$  é periódica na rede recíproca. Podemos então, escrevê-la como uma série de Fourier em ondas planas com vetores de onda na recíproca da rede recíproca, ou seja, na rede direta. Desse modo, para um  $\vec{r}$  fixo, podemos definir:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} f_n(\vec{R}, \vec{r}) e^{i\vec{R}\cdot\vec{k}}. \quad (2.22)$$

Os coeficientes de Fourier da Eq. (2.22) são dados pela fórmula de inversão:

$$f_n(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\nu} \int d\vec{k} e^{i\vec{R}\cdot\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.23)$$

aqui  $\nu$  é o volume no espaço  $k$  da primeira zona de Brillouin, e a integral se dá sobre a zona. A Eq. (2.22) é da forma (2.12), se a função  $f_n(\vec{R}, \vec{r})$  depender de  $\vec{r}$  e  $\vec{R}$  apenas por meio de sua diferença  $(\vec{r} - \vec{R})$ . Mas se  $\vec{r}$  e  $\vec{R}$  forem trocados por um vetor qualquer da rede de Bravais, como consequência direta da Eq. (2.23) e do teorema de Bloch em sua

formulação alternativa (Eq.(2.5)),  $f_n$  será, de fato, inalterada. Dessa forma:

$$f_n(\vec{R}, \vec{r}) = \phi_n(\vec{r} - \vec{R}). \quad (2.24)$$

As funções de Wannier  $\psi_n(\vec{r} - \vec{R})$  em diferentes sítios são ortogonais. Como o conjunto completo de funções de Bloch pode ser escrito como uma combinação linear das funções de Wannier, estas formam um conjunto ortogonal completo, para todo  $n$  e  $\vec{R}$ . Portanto, elas oferecem uma base alternativa para a descrição exata dos níveis do elétron em um potencial cristalino.

## 2.4 Alguns Exemplos

Nesta seção, mostraremos algumas aplicações referentes ao que foi estudado ao longo deste capítulo em diferentes problemas físicos. Serão apresentados alguns resultados analíticos para o caso de uma rede cristalina pura e unidimensional e para uma rede unidimensional com um defeito central no potencial *on-site*, defeito no *hopping* e para uma cadeia unidimensional com um potencial tipo degrau.

### 2.4.1 Rede Cristalina Pura e Unidimensional

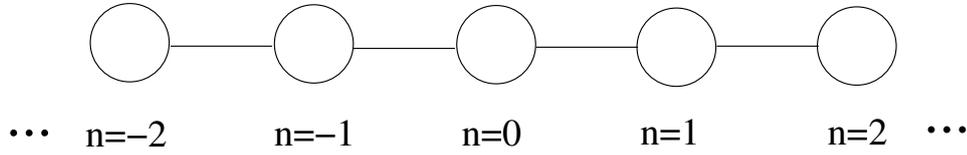
Vamos assumir que os íons são distribuídos de maneira regular ao longo de uma rede unidimensional, como mostrado na Figura 2.2. Cada íon da rede possui um orbital  $n$ , de modo que os elétrons podem ocupar estes orbitais. Cada elétron possui uma energia  $V_n$  associada à energia potencial do orbital ocupado, essa energia é também conhecida como energia potencial *on-site*. Consideraremos que todos os íons são iguais e usaremos a aproximação *tight-binding* descrita na seção anterior. Aqui, a superposição dos orbitais é pequena, logo, o movimento do elétron está restrito aos primeiros vizinhos. Ou seja, o elétron pode apenas “saltar” para os sítios  $n + 1$  e  $n - 1$ .

Portanto, o hamiltoniano que descreve o presente problema é dado por:

$$\hat{H} = \sum_n V_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| - \sum_n \gamma_{n,n\pm 1} (|\phi_n\rangle \langle \phi_{n+1}| + |\phi_n\rangle \langle \phi_{n-1}|), \quad (2.25)$$

sendo o termo  $\gamma_{n,n\pm 1}$  o termo de *hopping* que corresponde à superposição das funções de

Figura 2.2: Representação esquemática de uma rede cristalina unidimensional com todos os íons iguais e regularmente espaçados.



Fonte: Autor, 2018.

onda de átomos vizinhos e está associado à energia do salto do elétron de um ponto a outro da rede cristalina.

Como estamos usando a aproximação TB, podemos escrever a função de onda do elétron em qualquer ponto da rede como uma combinação linear dos orbitais atômicos, dessa forma:

$$|\psi_n\rangle = \sum_n \psi_n |\phi_n\rangle, \quad (2.26)$$

sendo  $\psi_n$  a amplitude da função de onda no sítio  $n$ . Para encontrarmos as autoenergias do sistema, devemos resolver a equação de Schrödinger:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (2.27)$$

Sustituindo as Eqs. (2.25) e (2.26), na equação de Schrödinger, obtemos:

$$V_n \psi_n - \gamma_{n,n+1} \psi_{n,n+1} - \gamma_{n,n-1} \psi_{n,n-1} = E \psi_n. \quad (2.28)$$

Como todos os íons são iguais, o termo de *hopping* é o mesmo ( $\gamma_{n,n\pm 1} = \gamma$ ) ao longo de toda a rede e por simplicidade, consideraremos  $V_n = 0$ , dessa forma:

$$-\gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = E \psi_n. \quad (2.29)$$

Através das funções de Wannier, podemos escrever as amplitudes  $\psi_n$ , como  $\psi_n = C e^{ikna}$ , sendo  $a$  a distância interatômica. Desse modo:

$$\begin{aligned} E e^{ikna} &= -\gamma(e^{ika(n+1)} + e^{ika(n-1)}) \\ E &= -2\gamma \cos(ka). \end{aligned} \quad (2.30)$$

A curva de dispersão para o presente problema (Eq. (2.30)) é mostrada na Figura 2.1a. Note que, a energia  $E$  varia entre  $-2\gamma < E < 2\gamma$  e a largura da banda é  $4\gamma$ . A Figura 2.1b mostra o gráfico da energia  $E$  em função da distância interatômica  $a$ . Observamos que, a largura da banda diminui à medida que a distância interatômica aumenta. No limite em que  $a$  é muito grande, ou seja, o átomo está isolado,  $E = E_0$ , como esperado.

### 2.4.2 Rede Cristalina Unidimensional com Defeito no Potencial On-site

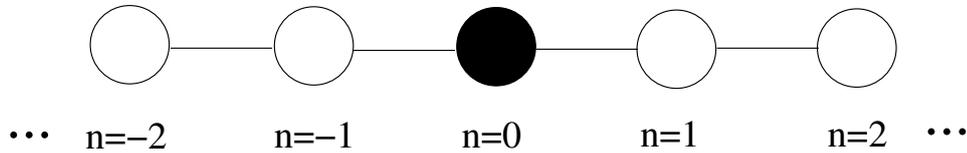
Nesta seção mostraremos os resultados analíticos para uma rede *tight-binding* unidimensional com um defeito central no potencial *on-site*. O formalismo usado será o mesmo da seção anterior. No entanto, aqui, nosso objetivo principal é explorar as propriedades de transporte eletrônico do sistema. A geometria do nosso problema é análoga ao sistema estudado na seção anterior, a única diferença consiste na presença de um defeito no centro da rede, esse defeito é introduzido na rede por meio de um sítio com energia potencial *on-site* diferente dos demais sítios, o que pode ser exemplificado como um átomo diferente no centro da cadeia. A Figura 2.3 mostra a representação esquemática do sistema. Dessa forma, o hamiltoniano que descreve o presente problema é análogo ao da rede pura (Eq. (2.25)). Seguindo os mesmos passos descritos na seção anterior, obtemos uma equação análoga à Eq.(2.29):

$$V_n\psi_n - \gamma(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = E\psi_n, \quad (2.31)$$

consideramos que  $V_n = 0$  para todos os sítios, exceto para o sítio  $n = 1$ , sendo  $V_1 = V$ , por simplicidade iremos adotar  $\gamma = 1$ . O procedimento para obtermos a relação para a curva de dispersão é exatamente o mesmo que usamos na seção anterior, com isso obtemos:  $E = -2 \cos k$ , com  $k \in [-\pi, \pi]$ . Aqui e nos próximos exemplos que estudaremos ao longo dessa seção, consideraremos que a distância interatômica  $a$  é igual à unidade.

Quando uma onda com número de onda  $k$  é inserida, pela esquerda, na cadeia, ela será espalhada pelo defeito e terá uma parte refletida e outra transmitida. Logo, à esquerda do defeito haverá duas ondas: a incidente de amplitude  $R_0$  e a refletida de amplitude  $R$ , já à direita do defeito, teremos a onda transmitida de amplitude  $T$ , dessa

Figura 2.3: Representação esquemática de uma cadeia discreta linear com um defeito central no potencial *on-site*.



Fonte: Autor, 2018.

forma:

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 1 \\ T e^{ikn}, & n \geq N \end{cases}, \quad (2.32)$$

$N$  indica o número de sítios com potencial *on-site*  $V \neq 0$ , neste caso  $N = 1$ .

Nosso objetivo agora é encontrarmos uma expressão para o coeficiente de transmissão, definido por  $t \equiv |T|^2/|R_0|^2$ .

A partir das funções de onda para os sítios  $n = 0$  e  $n = 1$ , obtidas através da Eq. (2.32), obtemos:

$$R_0 = \frac{\psi_0 e^{-ik} - \psi_1}{e^{-ik} - e^{ik}}. \quad (2.33)$$

Usando a Eq. (2.31) para  $n = 1$ , temos:

$$\psi_0 = -\psi_2 + (V - E)\psi_1, \quad (2.34)$$

sendo  $\psi_1 = T e^{ik}$  e  $\psi_2 = T e^{2ik}$ , obtidos através da Eq.(2.32).

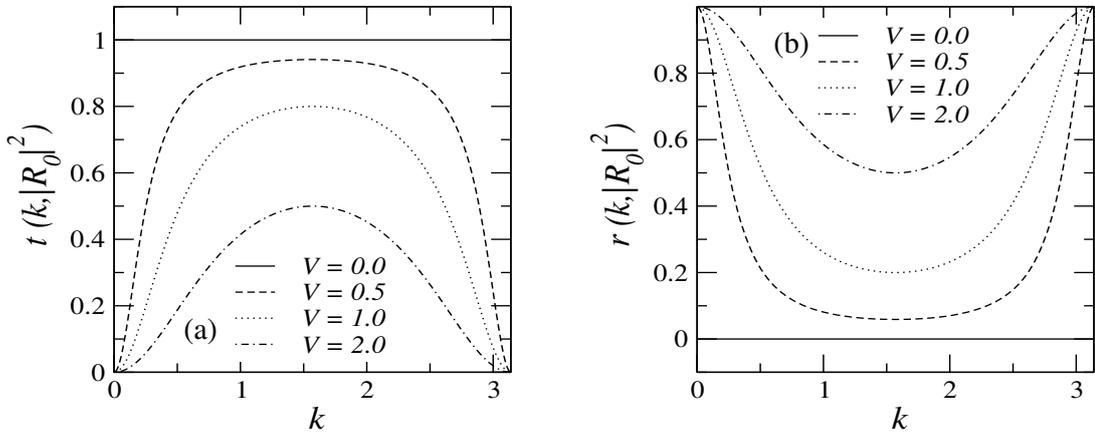
Sustituindo a equação acima em (2.33) e depois de um pouco de álgebra, obtemos uma expressão que nos fornece o comportamento da transmissão em função do número de onda:

$$t(k, |R_0|^2) \equiv \frac{|T|^2}{|R_0|^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{V}{2 \operatorname{sen} k}\right)^2}. \quad (2.35)$$

Podemos ainda encontrar uma expressão para o coeficiente de reflexão,  $r \equiv |R|^2/|R_0|^2$ , basta relacionarmos as amplitudes das ondas refletida e transmitida, seguindo o mesmo procedimento usado para a obtenção do coeficiente de transmissão. Dessa forma:

$$r(k, |R_0|^2) \equiv \frac{|R|^2}{|R_0|^2} = \frac{V^2}{4\text{sen}^2(k) + V^2}. \quad (2.36)$$

Figura 2.4: (a) Espectro de transmissão e (b) reflexão para uma cadeia unidimensional com um defeito no potencial *on-site* para diferentes valores da energia potencial  $V$  e para  $|R_0|^2 = 2.0$ .



Fonte: Autor, 2016.

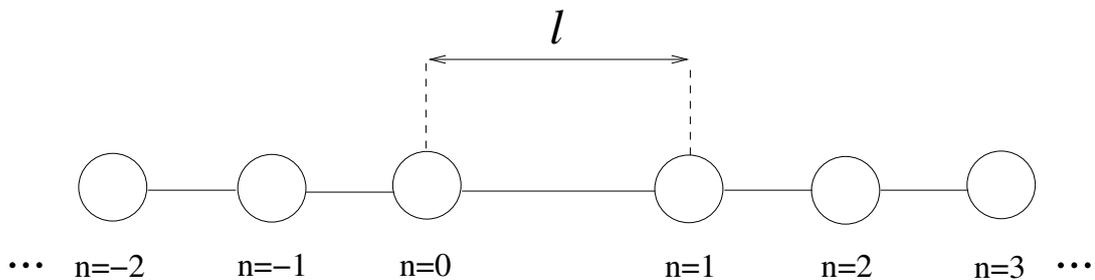
Analisando a Figura 2.4, note que a transmissão só será igual à unidade quando  $V = 0$ , ou seja, quando tivermos uma rede pura. A transmissão é nula para  $k = 0$  e  $k = \pi$  (limite da zona de Brillouin) e máxima para  $k = \pi/2$ , como pode ser observado na Figura 2.4. Vale salientar ainda que  $t + r$  é sempre igual a unidade, para qualquer valor de  $k$  e  $V$ .

### 2.4.3 Rede Cristalina Unidimensional com Defeito no Hopping

Nesta seção, continuaremos estudando as propriedades de transmissão para uma cadeia unidimensional discreta com um defeito central. A equação que descreve o comportamento do sistema é a mesma para uma cadeia unidimensional pura (Eq. (2.28)) e a função de onda para incidência pelo lado esquerdo também é dada pela Eq.(2.32). Entretanto, aqui, o defeito é inserido na rede devido a uma diferença na taxa de *hopping*

(ver Figura 2.5): a taxa de *hopping* entre os sítios  $n = 0$  e  $n = 1$  vale  $\gamma_{0,1} = \gamma_{1,0} = l$  e possui valor unitário entre os demais sítios da rede. Adotamos, por simplicidade,  $V_n = 0$ .

Figura 2.5: Representação esquemática de uma cadeia discreta unidimensional com defeito central na taxa de *hopping*.



Fonte: Autor, 2018.

Usando as Eqs. (2.28) (2.32), podemos calcular o coeficiente de transmissão:

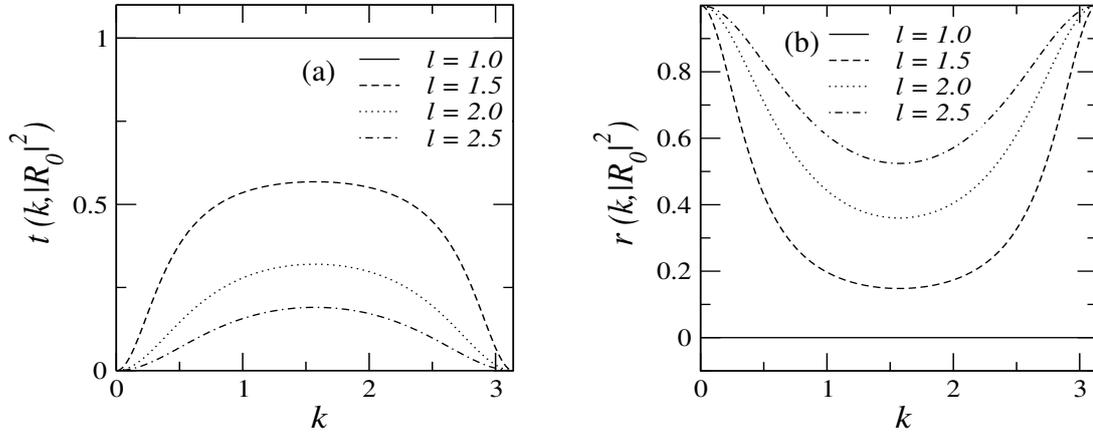
$$t = \frac{4l^4 \sin^2 k}{l^4 - 2l^2 \cos(2k) + 1}. \quad (2.37)$$

Procedendo de modo análogo, podemos calcular o coeficiente de reflexão:

$$r = \frac{(l^2 - 1)^2}{l^4 - 2l^2 \cos(2k) + 1}. \quad (2.38)$$

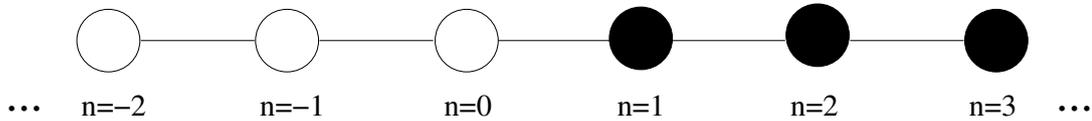
Na Figura 2.6a mostramos o gráfico para o coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  da onda incidente para diferentes valores da taxa de *hopping*  $l$  entre o sítio  $n = 0$  e  $n = 1$ . Note que quando  $l = 1.0$ , ou seja, quando as taxas de *hopping* entre todos os sítios da rede têm o mesmo valor, a transmissão é máxima e igual a unidade. Conforme aumentamos o valor de  $l$  a transmissão diminui, como esperado. Pois a taxa de *hopping* está associada à energia que o elétron possui para “saltar” de um sítio para outro. Já na Figura 2.6b mostramos o gráfico do coeficiente de reflexão em função de  $k$ . Quando  $l = 1.0$ , temos que o coeficiente de reflexão é nulo para qualquer valor de  $k$ , a onda não sofre reflexão. Observamos ainda que o  $r$  aumenta à medida que aumentamos o valor de  $l$  e  $t + r = 1$ , ou seja, há a conservação da intensidade da onda.

Figura 2.6: (a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $l$ , para uma onda plana inserida numa cadeia unidimensional com um defeito central na taxa de hopping.



Fonte: Autor, 2018.

Figura 2.7: Representação esquemática de uma cadeia discreta unidimensional com potencial tipo-degrau.



Fonte: Autor, 2018.

#### 2.4.4 Rede Cristalina Unidimensional Tipo-Degrau

Nesta seção, iremos estudar as propriedades de transmissão numa cadeia linear unidimensional tipo-degrau (ver Figura 2.6). A equação que descreve a dinâmica do sistema é a mesma usada para uma rede unidimensional pura ( Eq. (2.28)), aqui também será considerado uma taxa de *hopping* unitária, no entanto:

$$V_n = \begin{cases} 0, & n \leq 0 \\ V, & n \geq 1 \end{cases} \quad (2.39)$$

A onda incidente com número de onda  $k_1$  ao ser inserida, pela esquerda na cadeia, será espalhada ao atingir o sítio ( $n = 1$ ) devido ao aumento da energia potencial *on-site*, que até então era nula e a partir do sítio  $n = 1$ , passa a ter o valor  $V$ . A onda, terá

portanto, uma parte refletida e outra transmitida. Logo, para  $n \leq 1$  temos duas ondas: a incidente de amplitude  $R_0$  e a refletida de amplitude  $R$ , já para  $n \geq 1$ , teremos uma onda transmitida de amplitude  $T$  e número de onda  $k_2$ , logo:

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ik_1 n} + R e^{-ik_1 n}, & n \leq 1 \\ T e^{ik_2 n}, & n \geq 1 \end{cases} \quad (2.40)$$

A relação de dispersão para  $n \leq 1$  é  $E_1 = -2 \cos(k_1)$ , já para a região em que  $n \geq 1$ , temos  $E_2 = -2 \cos(k_2) + V$ .

Calcularemos primeiramente o coeficiente de reflexão, para isso usamos as Eqs. (2.28) e (2.40). E após alguma álgebra, obtemos:

$$R \equiv \frac{|R|^2}{|R_0|^2} = \frac{\text{sen}^2\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right)}{\text{sen}^2\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right)}. \quad (2.41)$$

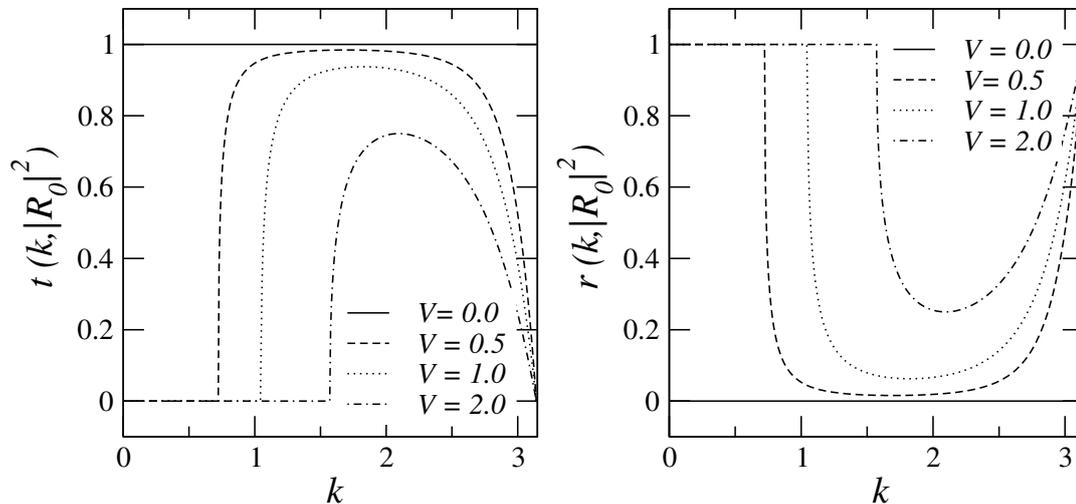
Já para o cálculo do coeficiente de transmissão devemos lembrar que agora a onda transmitida está se propagando em um meio diferente da onda incidente, logo o coeficiente de transmissão não pode ser definido apenas como  $t = \frac{|T|^2}{|R_0|^2}$ . Este deve levar em consideração as diferentes velocidades da onda nos dois meios:

$$t \equiv \frac{v_2 |T|^2}{v_1 |R_0|^2} = \frac{\text{sen}(k_2) \text{sen}^2(k_1)}{\text{sen}(k_1) \text{sen}^2\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right)}, \quad (2.42)$$

sendo  $v_1$  a velocidade de grupo da onda na região  $n \leq 1$  e  $v_2$  a velocidade de grupo da onda na região em que  $n \geq 1$ , a velocidade de grupo é calculada por meio de  $v_i = \frac{dE_i}{dk_i}$ .

Na Figura 2.8, mostramos o comportamento do coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k_1$  da onda incidente, para valores distintos de  $V$ . Devemos lembrar que, o número de onda de uma onda depende da velocidade de propagação da onda no meio e que  $k_1$  e  $k_2$  estão relacionados por meio das relações de dispersão para cada região. A depender dos valores de  $k_1$  e  $V$ ,  $k_2$  pode ser imaginário, representando assim uma onda evanescente. Note também que, conforme  $V$  aumenta, a faixa de transmissão em função de  $k_1$  diminui, pois diminuimos a região de sobreposição das bandas de energias das duas cadeias.

Figura 2.8: (a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão em função do número de onda da onda incidente  $k_1$  para valores distintos de  $V$ .

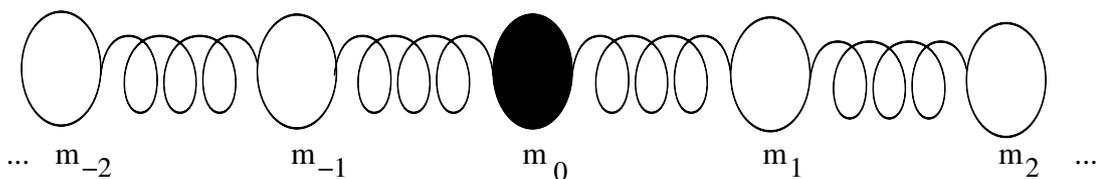


Fonte: Autor, 2018.

### 2.4.5 Análogo Clássico: Cadeia de Massa-Mola Acopladas

Nesta seção estudaremos o análogo clássico dos sistemas que estudamos ao longo deste capítulo. O comportamento de um elétron numa rede cristalina unidimensional é análogo ao de uma partícula em um potencial anarmônico. Diante disso, vamos fazer uma analogia com a mecânica clássica: vamos supor que os átomos possuem massa  $m$  e estão ligados por molas. Neste contexto, estudaremos dois sistemas de cadeias unidimensionais de massa-mola. Introduziremos dois tipos de defeitos distintos em cada uma das cadeias em análise.

Figura 2.9: Representação esquemática de uma cadeia de massas-mola acopladas defeito central introduzido por meio de uma massa com valor diferente das demais massas da cadeia.



Fonte: Autor, 2018.

Na primeira cadeia consideraremos que todas as massas que compõem o sistema possuem um valor fixo e igual a  $m$ , exceto a massa central que possui um valor  $m_0$  (ver Figura 2.9). Note que, esse modelo é análogo ao estudado na seção 2.4.2 para uma cadeia unidimensional com um defeito central no potencial *on-site*. Em todas as análises mostradas a seguir para o presente sistema, por simplicidade será considerado que o valor da constante elástica  $\gamma$  que une as massas é unitário. Iremos introduzir uma onda plana com número de onda  $k$  ao longo da cadeia. Devido à presença do defeito teremos além da onda incidente uma onda transmitida e uma refletida, que obedecerão a seguinte condição de contorno:

$$x_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 0 \\ T e^{ikn}, & n \geq 0 \end{cases}, \quad (2.43)$$

A equação que descreve o comportamento do sistema, é:

$$m_n \frac{d^2}{dt^2} x_n(t) = -\gamma_{n,n+1} [x_n(t) - x_{n+1}(t)] - \gamma_{n,n-1} [x_n(t) - x_{n-1}(t)], \quad (2.44)$$

sendo  $x_n(t) = x_n e^{iE(k)t}$  e a relação de dispersão é:  $mE^2 = 2\gamma - 2\gamma \cos(k)$ .

Para  $m_0$ , temos:

$$m_0 E^2 x_0 = \gamma(x_0 - x_1) + \gamma(x_0 - x_{-1}). \quad (2.45)$$

Para  $m_1$ :

$$m_1 E^2 x_1 = \gamma(x_1 - x_2) + \gamma(x_1 - x_0). \quad (2.46)$$

Usando as Eqs. (2.45), (2.46) e as condições de contorno, e após algum algebrismo encontramos as equações para o coeficiente de transmissão e reflexão:

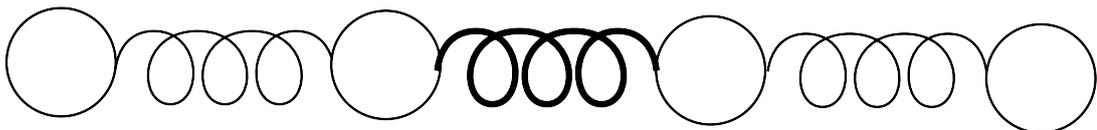
$$t \equiv \frac{|T|^2}{|R_0|^2} = \frac{4\gamma^4 \sin^2(k)}{\frac{4\gamma^4 m_0^2}{m^2} (\cos(k) - 1)^2 + 8\gamma(1 - \cos(k)) + \frac{8\gamma^4 m_0}{m} (2\cos(k) - \cos^2(k) - 1)} \quad (2.47)$$

$$r \equiv \frac{|R|^2}{|R_0|^2} = \frac{\frac{4\gamma^4 m_0^2}{m^2} (\cos(k) - 1)^2 + 8\gamma(1 - \cos(k)) + \frac{8\gamma^4 m_0}{m} (2\cos(k) - \cos^2(k) - 1) - 4\gamma^4 \sin^2(k)}{\frac{4\gamma^4 m_0^2}{m^2} (\cos(k) - 1)^2 + 8\gamma(1 - \cos(k)) + \frac{8\gamma^4 m_0}{m} (2\cos(k) - \cos^2(k) - 1)} \quad (2.48)$$

Na Fig. 2.10a mostramos o gráfico do coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  da onda incidente para valores distintos da massa  $m_1$ . Em todos os casos apresentados na Fig. 2.10 foi considerado  $m_n = 1.0$ , exceto para  $n = 1.0$ , e variamos  $k$  de 0 a  $\pi$ . Note que, quando a massa  $m_1 = m$ , ou seja, quando não temos defeito na rede,  $t = 1.0$ , para qualquer valor de  $k$ , como esperado. Conforme aumentamos os valores para  $m_1$ , a transmissão diminui, observe ainda que, na presença do defeito, a transmissão é sempre máxima e unitária para  $k = 0$  e nula quando  $k = \pi$ , nos limites da zona de Brillouin, independente dos valores de  $m_1$ .

O gráfico para o coeficiente de reflexão em função do número de onda  $k$  é mostrado na Fig. 2.10b. Notamos que na ausência do defeito a onda incidente é completamente transmitida ao longo da cadeia, logo  $r = 0$ , e conforme aumentamos os valores de  $m_1$  observamos um comportamento inverso ao descrito para o caso do coeficiente de transmissão, à medida que  $m_1$  aumenta,  $r$  também aumenta e é nulo quando  $k = 0$  e máximo quando  $k = \pi$ .

Figura 2.10: Representação esquemática de uma cadeia de massas-mola acopladas com um defeito introduzido por meio de uma mola com constante elástica diferente das demais e situada no centro da cadeia.

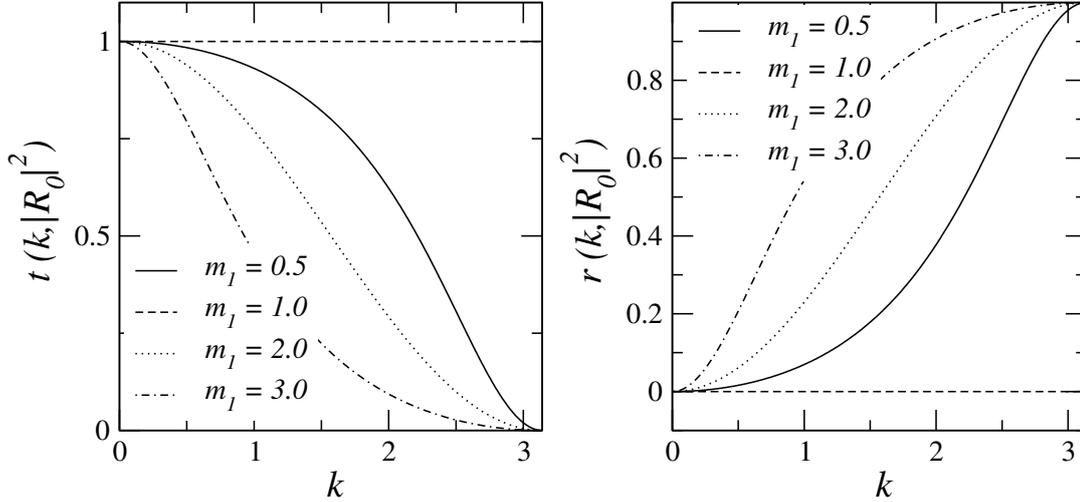


Fonte: Autor, 2018.

O segundo sistema que estudaremos nessa seção também consiste de uma cadeia unidimensional de massa-mola acopladas, sendo que aqui todas as massas possuem o mesmo valor  $m$ , o defeito agora será introduzido nas molas: vamos considerar que todas as molas presentes na cadeia são iguais e possuem o mesmo valor  $\gamma$  para a constante elástica, exceto a mola que acopla a massa  $m_0$  a  $m_1$  (ver Figura 2.11). Uma onda plana com número de onda  $k$  será introduzida na cadeia pelo lado esquerdo, a fim de estudarmos as propriedades de transmissão do sistema.

As condições de contorno do problema são análogas ao caso anterior, na região antes

Figura 2.11: (a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão para uma onda plana em função de  $k$  para valores distintos de  $m$ , para uma cadeia de massas-mola acopladas e com um defeito central introduzido por meio de uma massa com valor diferente das demais.



Fonte: Autor, 2018.

do defeito ( $n < 0$ ) teremos uma onda incidente e uma onda refletida devido à presença do defeito, já na região posterior ao defeito ( $n \geq 1$ ) teremos apenas a onda transmitida, ou seja:

$$x_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 0 \\ T e^{ikn}, & n \geq 1 \end{cases} \quad (2.49)$$

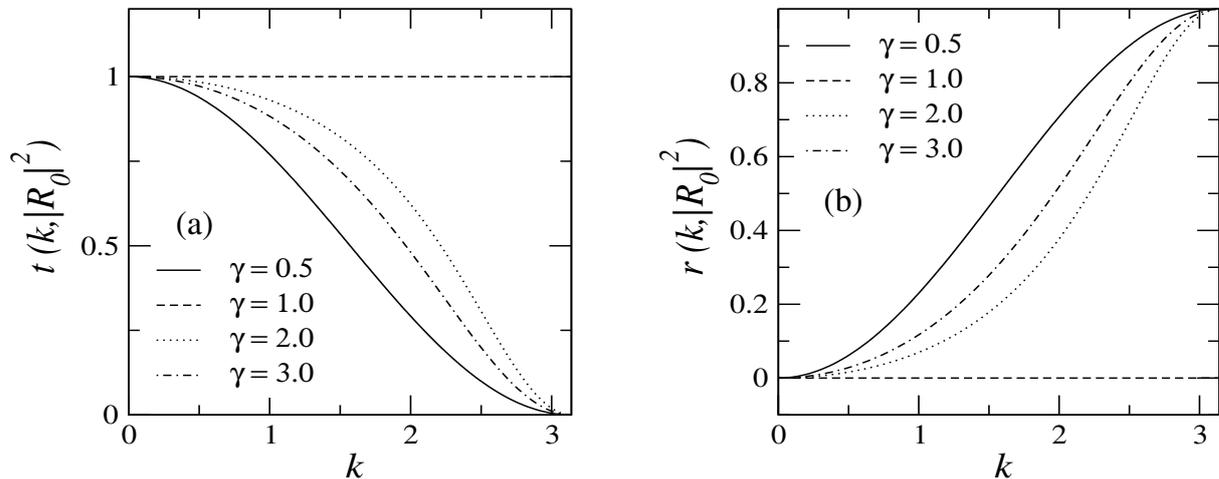
A equação que descreve o comportamento do sistema tem a forma de (2.44) e o procedimento para encontrarmos as expressões para os coeficientes de transmissão e reflexão é exatamente o mesmo realizado para o caso anterior.

$$t(k, |R_0|^2) = \frac{4\gamma^4 \sin^2(k)}{4 + 4\cos^2(k) - 8\cos(k) - 8\gamma(1 - 2\cos(k))^2 + 8\gamma^2(1 - \cos(k))} \quad (2.50)$$

$$r(k, |R_0|^2) = \frac{4 + 4\cos^2(k) - 8\cos(k) - 8\gamma(1 - 2\cos(k))^2 + 8\gamma^2(1 - \cos(k)) - 4\gamma^4 \sin^2(k)}{4 + 4\cos^2(k) - 8\cos(k) - 8\gamma(1 - 2\cos(k))^2 + 8\gamma^2(1 - \cos(k))} \quad (2.51)$$

Na Figura 2.12 é mostrado os gráficos para o coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  da onda incidente para valores distintos da constante

Figura 2.12: (a) Coeficiente de transmissão e (b) reflexão para uma onda plana em função de  $k$  para valores distintos de  $\gamma$ , para uma cadeia de massas-mola acopladas e com um defeito central introduzido por meio de uma mola com valor da constante elástica diferente das demais.



Fonte: Autor, 2018.

elástica  $\gamma$  da mola que une as massas  $m_0$  e  $m_1$ . Note que, quando  $\gamma = 1.0$  (ausência de defeito), temos que o o coeficiente de transmissão possui valor unitário enquanto o coeficiente de reflexão é nulo para qualquer valor de  $k$ . À medida que aumentamos o valor de  $\gamma$  a transmissão também aumenta, já o coeficiente de reflexão diminui. Observe ainda que, na presença do defeito  $\gamma \neq 1.0$ , a transmissão é unitária para  $k = 0.0$  e nula para  $k = \pi$ , independente dos valores da constante elástica.

### 3

# MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-HERMITIANA

Neste capítulo, será apresentada a motivação principal para o surgimento e desenvolvimento de uma mecânica quântica não-hermitiana. Será feito ainda, uma revisão bibliográfica mostrando os primeiros e principais trabalhos que utilizaram mecânica quântica não-hermitiana. Na seção 3.3, será mostrada a formulação da mecânica quântica não-hermitiana  $\mathcal{PT}$ -simétrica, e por fim, apresentaremos algumas aplicações de hamiltonianos não-hermitianos em diferentes problemas físicos, que possuem características em comum com nosso trabalho.

O início do século XX foi marcado por uma grande revolução científica, provocada pelo surgimento de duas novas teorias: a teoria da relatividade e a mecânica quântica. Tais teorias surgiram para explicar fenômenos que a física clássica (mecânica Newtoniana) não era capaz de explicar. As leis da física clássica não são válidas para corpos que viajam com uma velocidade comparável à velocidade da luz (domínio relativístico) e para sistemas na escala atômica e subatômica (domínio quântico). No entanto, vale salientar que a mecânica Newtoniana pode ser encarada como uma aproximação das novas teorias. Desde então, o estudo da mecânica quântica tem sido indispensável e é a base para o entendimento de diversos fenômenos que ocorrem em escalas muito pequenas, em diversas áreas da ciência. Temos como exemplo, o estudo das propriedades dos átomos e suas ligações químicas. Mesmo quando o objeto de estudo é macroscópico é necessário, em princípio, o entendimento do comportamento dos elementos que o compõem. Atualmente,

ainda existem alguns desafios para a unificação da mecânica quântica e a relatividade. No entanto, a grande maioria dos fenômenos atômicos são explicados pela mecânica quântica não-relativística, que será o nosso objeto de estudo nessa seção.

### 3.1 Hamiltonianos Não-Hermitianos

De todos os axiomas da mecânica quântica (ver apêndice B), apenas um não possui significado físico, mas meramente matemático, que é o que exige que o hamiltoniano, operador que descreve a dinâmica do sistema, seja hermitiano (Axioma 2). A utilidade desse axioma é clara, pois ele garante que todos os autoestados (autoenergias) do hamiltoniano sejam reais e que a evolução temporal do sistema seja unitária, por sua vez, isso implica que as probabilidades associadas ao hamiltoniano sejam preservadas. No entanto, apesar de a condição de hermiticidade ser suficiente para a obtenção de um espectro de energias inteiramente real, ela não é necessária.

Portanto, nas próximas seções deste capítulo estudaremos o formalismo não-hermitiano da mecânica quântica. Desejamos, inicialmente, mostrar a motivação para o desenvolvimento de tal formalismo, bem como suas vantagens em relação ao formalismo padrão da mecânica quântica. É importante ressaltar que ainda não existe uma conexão que permita mapear resultados que foram obtidos usando um formalismo para o outro. No entanto, os mesmos resultados físicos devem ser obtidos usando os dois formalismos.

Existem várias razões que explicam e motivam o desenvolvimento de um formalismo não-hermitiano para a mecânica quântica, aqui citaremos algumas:

- Alguns sistemas físicos só podem ser totalmente descritos através hamiltonianos não-hermitianos. Em óptica, por exemplo, quando o sistema em estudo possui um índice de refração complexo, em teoria quântica de campos, onde são investigadas as propriedades de simetria de paridade-tempo ( $PT$ ) do hamiltoniano, ou ainda, no estudo de fenômenos dissipativos, como o processo de difusão em sistemas biológicos (MOISEYEV, 2011).
- Alguns problemas que, em princípio, podem ser resolvidos com muita dificuldade

usando o formalismo padrão da mecânica quântica, são resolvidos de maneira simples e elegante no formalismo não-hermitiano. Como exemplo temos a propagação de ondas de matéria que são descritas pela equação de Schrödinger e a propagação da luz em guias de onda na aproximação paraxial, que estão relacionadas a fenômenos físicos distintos, mas obedecem a mesma equação matemática. A propagação dos pacotes de ondas dos dois casos citados acima é muito mais simples quando é usado o formalismo não-hermitiano da mecânica quântica em vez do formalismo padrão (MOISEYEV, 2011).

- No âmbito da mecânica quântica não-hermitiana, pode-se obter uma melhor compreensão de diferentes métodos e teorias desenvolvidas no formalismo (hermitiano) padrão da mecânica quântica. Um exemplo disso é o cálculo dos pólos da matriz de espalhamento para problemas de muitos corpos. Dentro do quadro do formalismo padrão da mecânica quântica, é muito difícil, senão impossível (pelo aparato computacional disponíveis), calcular os pólos da matriz de espalhamento para sistemas atômicos ou moleculares de muitos elétrons. Já no formalismo não-hermitiano, os pólos da matriz de espalhamento podem ser obtidos diretamente ao calcular os autovalores complexos do hamiltoniano não-hermitiano (MOISEYEV, 2011).

## 3.2 Uma Breve Revisão Bibliográfica

Nesta seção faremos uma breve revisão bibliográfica acerca dos primeiros e mais relevantes trabalhos publicados utilizando hamiltonianos não-hermitianos.

Em 1959, Wu publicou um artigo no qual ele estudava um sistema de bósons com interação do tipo “esferas duras” (WU, 1959). O objetivo do seu trabalho era calcular a energia do estado fundamental do sistema. No entanto, um problema comum que surgia nesse tipo de cálculo era que a energia do estado fundamental era divergente. A solução encontrada por Wu, para resolver esse problema, foi considerar um hamiltoniano não-hermitiano não-diagonalizável. Os autovalores associados ao hamiltoniano eram reais e estavam associados a baixos níveis de energias do sistema de Bose. Contudo, Wu não conseguiu explicar de maneira satisfatória a sua escolha para resolução do problema.

Alguns anos depois, em 1969, Wu e Bender estudaram o problema de um oscilador anarmônico (WU e BENDER; 1969) descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2}\varphi'^2 + \frac{1}{2}m^2\varphi^2 + \lambda\varphi^4. \quad (3.1)$$

O parâmetro  $\lambda$  podia assumir valores complexos, dessa maneira, o hamiltoniano tornava-se não-hermitiano. Tal abordagem foi adotada porque os métodos de perturbação para o cálculo do estado fundamental também forneciam resultados divergentes. Mais tarde, esse problema foi solucionado pela teoria de perturbação renormalizada (SCHWARTZ, 2014).

Já em 1975, Haydock e Kelly usaram hamiltonianos não-hermitianos para calcular a estrutura eletrônica do cristal de arsênio (HAYDOCK, KELLY; 1975). Este é um dos primeiros trabalhos que afirma de maneira explícita que a condição de hermiticidade do hamiltoniano é suficiente, mas não necessária para a obtenção de um espectro de energia real.

Em 1996, Nelson e Hatano investigaram o problema de localização de Anderson numa rede unidimensional não-hermitiana desordenada (NELSON e HATANO; 1996). Eles mostraram que um campo magnético imaginário evita a localização de Anderson. Tal resultado ficou conhecido como delocalização não-hermitiana e desde então este resultado tem sido revisado e utilizado por vários autores (BROUWER et al., 1997; GOLDSHEID e KHORUZHENKO; 1998, YURKEVICH e LERNER, 1999).

Estes são apenas alguns exemplos dos trabalhos, no período de 1959 e 1998, que fizeram uso de hamiltonianos não-hermitianos. O fator comum de todos esses trabalhos é que todos os autores usaram justificativas heurísticas e experimentais para o uso de tais hamiltonianos. Nenhuma base fundamental ou analítica foi apresentada para explicar suas escolhas. No entanto, o cenário muda, depois de 1998, com um trabalho seminal e que tem sido considerado um marco no estudo da mecânica quântica não-hermitiana de Bender e Boetcher (BENDER, BOETCHER; 1998). Nesse trabalho eles estudaram uma família de hamiltonianos não-hermitianos que apresentavam um espectro de energia totalmente real e o argumento usado para explicar a realidade do espectro foi a existência da simetria de paridade e inversão temporal (simetria  $\mathcal{PT}$ ). Eles mostraram que todo sistema quântico

em que a simetria  $\mathcal{PT}$  é conservada apresenta um espectro de energias totalmente real. Após a publicação deste artigo, surgiu uma gama de trabalhos usando hamiltonianos não-hermitianos nas mais diversas áreas da física. Na próxima seção será mostrado de maneira mais detalhada o desenvolvimento da mecânica quântica  $\mathcal{PT}$  simétrica de Bender e Boetcher.

### 3.3 Mecânica Quântica Não-Hermitiana $\mathcal{PT}$ -simétrica

Bender e Boetcher, em 1998, mostraram que existe uma classe de hamiltonianos não-hermitianos que, em determinados condições, possuem um espectro de energia inteiramente real (BENDER, BOETCHER; 1998). Tais hamiltonianos são denominados  $\mathcal{PT}$ -simétricos, sendo  $\mathcal{P}$  o operador de paridade e  $\mathcal{T}$  o operador de reversão temporal. Não sendo necessário, então, a condição de Hermiticidade de Dirac ( $H = H^\dagger$ ).

Mostraremos aqui que hamiltonianos  $\mathcal{PT}$ -simétricos são extensões complexas de hamiltonianos hermitianos, discutiremos ainda suas principais propriedades. As discussões apresentadas aqui são baseadas no trabalho de Bender e Boetcher (*Making sense of non-Hermitian Hamiltonians*) publicado em 2007. Para tanto, apresentaremos inicialmente as características dos operadores de paridade ( $\mathcal{P}$ ) e reversão temporal ( $\mathcal{T}$ ). A operação de paridade ou de inversão espacial, quando aplicado à transformação do sistema de coordenadas, muda o sistema de dextrógiro para levógiro, como mostrado na Figura 3.1. O efeito da aplicação do operador de inversão espacial  $\mathcal{P}$  nos operadores de coordenada ( $\hat{x}$ ) e momento ( $\hat{p}$ ) consiste em mudar seus sinais, ou seja:

$$\mathcal{P}\hat{x}\mathcal{P} = -\hat{x} \quad (3.2)$$

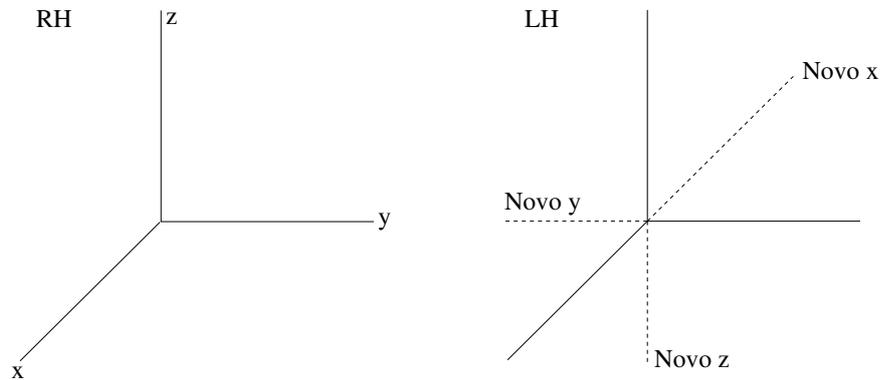
e

$$\mathcal{P}\hat{p}\mathcal{P} = -\hat{p}. \quad (3.3)$$

Note que  $\mathcal{P}$  é um operador linear e leva à invariância da relação fundamental de comutação da mecânica quântica:

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar\mathbf{1}, \quad (3.4)$$

Figura 3.1: Sistema dextrógiro (RH, right-handed) e levógiro (LH, left-handed).



Fonte: Autor, 2017.

sendo  $\mathbf{1}$  a matriz identidade. Já o operador de inversão temporal  $\mathcal{T}$  muda o sinal apenas quando aplicado no operador  $\hat{p}$ , dessa forma:

$$T\hat{x}T = \hat{x} \quad (3.5)$$

e

$$\mathcal{T}\hat{p}\mathcal{T} = -\hat{p}. \quad (3.6)$$

Para que a relação de comutação seja mantida, é necessário que:

$$\mathcal{T}i\mathcal{T} = -i. \quad (3.7)$$

A equação acima demonstra que o operador  $\mathcal{T}$  não é linear, ou seja,  $\mathcal{T}$  é antilinear. Como os operadores  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{T}$  são operadores de reflexão, seus quadrados devem obedecer:

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{T}^2 = \mathbf{1} \quad (3.8)$$

Através das características de  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{T}$ , descritas acima, é fácil mostrar que eles comutam, ou seja:

$$\mathcal{PT} - \mathcal{TP} = 0 \quad (3.9)$$

Um hamiltoniano ( $H^{\mathcal{PT}}$ )  $\mathcal{PT}$ -simétrico qualquer é definido em termos dos operadores de inversão de paridade e inversão temporal:

$$H^{\mathcal{PT}} \equiv (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT}). \quad (3.10)$$

Se  $H$  é  $\mathcal{PT}$ -simétrico, logo  $\mathcal{PT}$  comuta com  $H$ , ou seja:

$$H(\mathcal{PT}) - (\mathcal{PT})H = 0 \quad (3.11)$$

Para que um hamiltoniano seja  $\mathcal{PT}$ -simétrico não é necessário que ele seja hermitiano, ou seja, a condição de hermiticidade ( $H = H^\dagger$ ) não precisa ser satisfeita. Portanto, é possível descrever fenômenos, no âmbito da mecânica quântica, através de hamiltonianos não-hermitianos de maneira totalmente consistente.

Alguns exemplos de hamiltonianos  $\mathcal{PT}$ -simétricos que possuem espectros de energia totalmente reais e evolução temporal unitária, são:

$$H = \hat{p}^2 - \hat{x}^2 \quad (3.12)$$

e

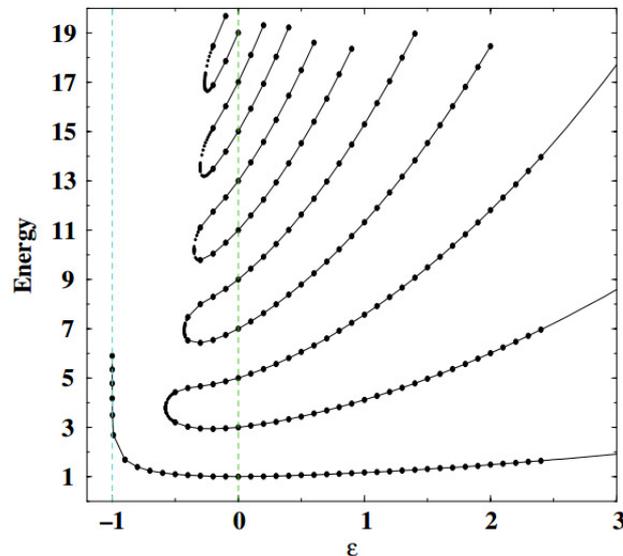
$$H = \hat{p}^2 + i\hat{x}^5. \quad (3.13)$$

Os hamiltonianos (3.12) e (3.13) são casos especiais de uma família de hamiltonianos  $\mathcal{PT}$ -simétricos:

$$H = \hat{p}^2 - \hat{x}^2(i\hat{x})^\epsilon, \quad (3.14)$$

sendo  $\epsilon$  um parâmetro real. Bender e Boetcher também mostraram que quando  $\epsilon \geq 0$  todos os autovalores dessa família de hamiltonianos são reais e positivos, mas quando  $\epsilon < 0$  pode haver alguns autovalores complexos (BENDER E BOETCHER, 1998). Quando  $\epsilon \geq 0$  temos uma região onde não há a quebra da simetria  $\mathcal{PT}$ , já  $\epsilon < 0$  corresponde à região a qual ocorre a quebra da simetria. Isso pode ser observado na Figura 3.2, que mostra os níveis de energia do hamiltoniano  $H = \hat{p}^2 - \hat{x}^2(i\hat{x})^\epsilon$  em função do parâmetro real  $\epsilon$ . Existem três regiões na Figura 3.2 quando  $\epsilon \geq 0$ , o espectro de energia é real e positivo e os níveis de energia crescem conforme  $\epsilon$  aumenta. A região em que  $\epsilon = 0$ , que corresponde ao oscilador harmônico, no qual os níveis de energias são conhecidos e dados por  $E_n = 2n + 1$ . E a região em que  $-1 \leq \epsilon < 0$ , nessa região há um número finito de autovalores reais e positivos e uma infinidade de valores complexos.

Figura 3.2: Níveis de energia do hamiltoniano  $H = \hat{p}^2 - \hat{x}^2(i\hat{x})^\epsilon$  em função do parâmetro real  $\epsilon$ .



Fonte: Bender e Boetcher, 1998.

A família de hamiltonianos descrita pela Eq. (3.14) pode ser encarada como uma extensão complexa do hamiltoniano do oscilador harmônico  $H = \hat{p}^2 + \hat{x}^2$ . O princípio geral usado por Bender e Boetcher para a construção de (20) foi começar com um hamiltoniano que fosse hermitiano e  $\mathcal{PT}$ -simétrico, em seguida a não-hermiticidade foi acrescentada através do parâmetro  $\epsilon$  de modo que o hamiltoniano deixa de ser hermitiano, mas continua sendo  $\mathcal{PT}$ -simétrico.

Ao longo desta seção foi mostrado uma nova classe de hamiltonianos descrevem fenômenos físicos, no âmbito da mecânica quântica, de modo consistente e que, no entanto, não satisfazem a condição de hermiticidade, tal condição foi substituída pela condição de  $\mathcal{PT}$  simetria, ou seja:  $H = H^{\mathcal{PT}}$ .

Nosso interesse, a partir de agora, é mostrar como calcular os autoestados de um hamiltoniano  $\mathcal{PT}$ -simétrico. Para isso, devemos solucionar a equação de Schrödinger:

$$H\psi = E\psi \quad (3.15)$$

A equação acima é usualmente escrita na forma diferencial, que deve ser resolvida

levando em consideração as condições de contorno da função de onda  $\psi$ :

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H\psi \quad (3.16)$$

No caso de hamiltonianos  $\mathcal{PT}$ -simétricos a escolha adequada das condições de contorno é fundamental, para que os resultados sejam fisicamente aceitáveis.

A solução estacionária da equação acima é:

$$\psi(t) = e^{iHt}\psi(0), \quad (3.17)$$

sendo  $e^{iHt}$  o que chamamos de operador evolução temporal. Se  $H$  é hermitiano, na mecânica quântica convencional, isso garante que o operador evolução temporal seja unitário. Consequentemente, a norma da função de onda  $\psi(t)$  permanece constante no tempo. Esse fato é uma característica imprescindível de um sistema quântico, pois a norma da função de onda é a probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar do espaço e esta probabilidade deve ser constante. Na mecânica quântica  $\mathcal{PT}$ -simétrica o hamiltoniano pode não ser hermitiano, mas ainda assim a norma da função de onda permanece independente do tempo.

Para o caso de um hamiltoniano  $\mathcal{PT}$ -simétrico o operador  $\mathcal{PT}$  comuta com  $H$  (ver Eq. (3.11)). Como o operador  $\mathcal{PT}$  é não-linear, os autoestados de  $H$  podem ou não ser autoestados de  $\mathcal{PT}$ .

Vamos ver o que pode dar errado se assumirmos que  $H$  e  $\mathcal{PT}$  possuem os mesmos autovalores. Seja  $\lambda$  o autovalor e a condição de autovalor é dada por:

$$\mathcal{PT}\psi = \lambda\psi. \quad (3.18)$$

Multiplicando a equação acima por  $\mathcal{PT}$  pela esquerda, obtemos:

$$(\mathcal{PT})^2\psi = \mathcal{PT}\lambda\psi. \quad (3.19)$$

Como:  $(\mathcal{PT})^2 = \mathbf{1}$ , temos:

$$\psi = \mathcal{PT}\lambda\psi \quad (3.20)$$

$$\psi = \mathcal{PT}\lambda(\mathcal{PT})^2\psi. \quad (3.21)$$

Como  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{T}$  comutam:

$$\psi = \mathcal{PT}\lambda(\mathcal{TP})^2\psi \quad (3.22)$$

$$\psi = \mathcal{PT}\lambda(\mathcal{TP})(\mathcal{TP})\psi. \quad (3.23)$$

Lembrando que  $\mathcal{T}$  é antilinear ( $\mathcal{T}i\mathcal{T} = -i$ ), temos que,  $\mathcal{T}\lambda\mathcal{T} = \lambda^*$ , então:

$$\psi = \mathcal{P}\lambda^*\mathcal{PT}\mathcal{P}\psi \quad (3.24)$$

$$= \mathcal{P}\lambda^*\mathcal{P}(\mathcal{PT}\psi)$$

$$= \mathcal{P}\lambda^*\mathcal{P}\lambda\psi$$

$$= \mathcal{PP}\lambda^*\lambda\psi$$

$$= \lambda^*\lambda\psi$$

$$\psi = |\lambda|^2\psi.$$

Temos então que,  $|\lambda|^2 = 1$  e, portanto, o autovalor  $\lambda$  do operador  $\mathcal{PT}$  é uma fase pura:

$$\lambda = e^{i\alpha}. \quad (3.25)$$

Agora, multiplicando a equação de autovalor (3.15) por  $\mathcal{PT}$  pela esquerda e usando a propriedade  $(\mathcal{PT})^2 = \mathbf{1}$ , temos:

$$(\mathcal{PT})H\psi = (\mathcal{PT})E(\mathcal{PT})^2\psi. \quad (3.26)$$

Usando a equação de autovalor (3.18), obtemos:

$$H\lambda\psi = (\mathcal{PT})E(\mathcal{PT})\lambda\psi. \quad (3.27)$$

Finalmente, usando a propriedade de que  $\mathcal{T}$  é antilinear:

$$E\lambda\psi = E^*\lambda\psi. \quad (3.28)$$

Sendo  $\lambda$  diferente de zero, concluímos, portanto, que  $E$  é real:  $E = E^*$ .

De modo geral, essa conclusão é falsa, como pode ser facilmente verificado na Figura 3.2. Para  $\epsilon < 0$  alguns dos autovalores desaparecem porque são complexos. Por outro lado, na região em que  $\epsilon \geq 0$  esta conclusão é correta. Bender e Boetcher foram levados, então, a

fazer a seguinte definição: se toda autofunção de um hamiltoniano  $\mathcal{PT}$  simétrico também é uma autofunção do operador de  $\mathcal{PT}$ , dizemos que a simetria  $\mathcal{PT}$  do hamiltoniano  $H$  é conservada. Por outro lado, se algumas das autofunções de um hamiltoniano  $\mathcal{PT}$  simétrico não são simultaneamente autofunções do operador  $\mathcal{PT}$ , dizemos que a simetria  $\mathcal{PT}$  de  $H$  é quebrada.

Dessa forma, a interpretação correta da Eq. (3.28) é que, se não há quebra da simetria  $\mathcal{PT}$  no sistema, todos os autovalores (autoenergias) do hamiltoniano são reais. A demonstração dessa interpretação levou anos para ser realizada, e foi provada, finalmente, de maneira completa e rigorosa apenas em 2001 por (DOREY et al., 2011).

## 3.4 Comparação das Teorias Quânticas Hermitiana e $\mathcal{PT}$ -simétrica

Iremos recordar agora alguns elementos básicos da mecânica quântica usual a fim de compará-los com seus respectivos análogos na mecânica quântica não-hermitiana  $\mathcal{PT}$ -simétrica.

### 3.4.1 Teoria Quântica Hermitiana

- Autofunções e Autovalores

As energias e os estados possíveis de um dado sistema são obtidos por meio das soluções da equação de Schrödinger (ver Axioma 6):

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle. \quad (3.29)$$

Para o caso particular em que a hamiltoniana  $H$  independe do tempo, a solução da equação acima pode ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \int H dt} |\psi\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= U |\psi\rangle, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$U$  é o operador de evolução temporal e é definido por  $U \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \int H dt}$ .

- Completeza

Há um teorema na teoria dos operadores lineares nos espaços de Hilbert que afirma que as autofunções de um hamiltoniano hermitiano são completas (BARATA, 2016). Isso significa que qualquer vetor  $\mathcal{X}$  (limite de norma finita) no espaço de Hilbert pode ser expresso como uma combinação linear das autofunções do hamiltoniano  $H$ :

$$\mathcal{X} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x). \quad (3.31)$$

A definição de completeza no espaço de coordenadas é a reconstrução do operador unidade ou operador de projeção (a função delta) como uma soma das autofunções:

$$\sum_{n=0}^{\infty} [\psi_n(x)]^\dagger \psi_n(y) = \delta(x - y), \quad (3.32)$$

aqui usamos a notação  $\psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle$ .

- Produto Interno e Ortogonalidade das Autofunções

Como  $H$  é hermitiano, as autofunções de  $H$  serão ortogonais em relação ao produto interno hermitiano padrão:

$$(\psi, \phi) \equiv \int dx [\psi(x)]^\dagger \phi(x). \quad (3.33)$$

A ortogonalidade significa que o produto interno de duas autofunções  $\psi_m(x)$  e  $\phi_n(x)$  associadas a diferentes autoenergias  $E_m \neq E_n$  é nulo:

$$(\psi_m, \phi_n) = 0. \quad (3.34)$$

- Ortonormalidade das Autofunções

Como o hamiltoniano é hermitiano, a norma de qualquer vetor deve ser sempre positiva. Isso significa que podemos normalizar as autofunções de  $H$ , de modo que a norma de cada autofunção seja unitária:

$$(\psi_n, \psi_n) = 1. \quad (3.35)$$

- Unitariedade e Evolução Temporal

Seja  $|\mathcal{X}\rangle$  um estado qualquer. Como o hamiltoniano é hermitiano e a evolução temporal é descrita pela Eq. (3.30), podemos calcular a norma da evolução temporal de  $|\mathcal{X}\rangle$ :

$$(\mathcal{X}(t), \mathcal{X}(t)) = (\mathcal{X}e^{iHt}, \mathcal{X}e^{-iHt}) = (\mathcal{X}, \mathcal{X}) = 1. \quad (3.36)$$

A equação acima mostra que independente da evolução temporal de um estado quântico qualquer, sua norma é sempre preservada.

### 3.4.2 Teoria Quântica $\mathcal{PT}$ -simétrica

Nesta seção faremos uma análise dos elementos básicos da mecânica quântica  $\mathcal{PT}$ -simétrica, a fim de compará-los com os elementos que compõem a base da mecânica quântica usual. Aqui iremos supor que o hamiltoniano não-hermitiano tem a forma (3.14). A novidade aqui é que não conhecemos, a priori, a definição do produto interno, como fizemos no caso da mecânica quântica hermitiana. Teremos que descobrir o produto interno correto no decorrer de nossa análise.

- Autofunções e Autovalores

Os autovalores e autovetores na mecânica quântica  $\mathcal{PT}$ -simétrica também são obtidos a partir da solução da equação de Schrödinger, sendo o hamiltoniano  $H$   $\mathcal{PT}$ -simétrico.

- Completeza

A relação de completeza para a mecânica quântica  $\mathcal{PT}$ -simétrica é dada por:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \psi_n(x) \psi_n(y) = \delta(x - y). \quad (3.37)$$

A prova matemática da equação acima pode ser encontrada em (MEZINCESCU, 2000; BENDER e WANG, 2001).

- Produto Interno e Ortogonalidade das Autofunções

Para construir um produto interno com norma positiva para um hamiltoniano não-hermitiano com simetria  $\mathcal{PT}$ , usaremos o fato de que  $H = H^{\mathcal{PT}}$ . De modo análogo ao produto interno de Dirac da mecânica quântica padrão, o produto interno não-hermitiano consiste em substituir a operação transposto conjugado ( $\dagger$ ), pelo operador  $\mathcal{PT}$ , dessa forma definimos o produto interno para a mecânica quântica  $\mathcal{PT}$ -simétrica, como:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle_{\mathcal{PT}} = \int [\psi_n(x)]^{\mathcal{PT}} \psi_m(x) dx \quad (3.38)$$

$$= \int [\mathcal{PT} \psi_n(x)] \psi_m(x) dx \quad (3.39)$$

$$= \int \psi_n(-x)^* \psi_m(x) dx. \quad (3.40)$$

Temos que  $\psi_n(x)$  e  $\psi_m(x)$  são soluções independentes da equação de Schrödinger com autovalores distintos, com isso temos que o produto interno entre elas será nulo sempre que  $n \neq m$ . Nesse contexto, a norma dos vetores de estado é definida de maneira diferente da mecânica quântica usual:

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle_{\mathcal{PT}} = \int \psi_n(-x)^* \psi_n(x) dx = (-1)^n. \quad (3.41)$$

Essa equação também foi verificada numericamente em (MEZINCESCU, 2000; BENDER e WANG, 2001). Da equação acima notamos que há estados que podem ter a norma negativa ( $n$  ímpar). Então para construirmos um produto interno com a norma positiva para um hamiltoniano não-hermitiano com simetria  $\mathcal{PT}$  preservada é necessário construir um novo operador linear  $\mathcal{C}$  que comute com  $H$  e com  $\mathcal{PT}$ . Como  $\mathcal{C}$  comuta com o hamiltoniano, ele representa uma simetria de  $H$ . A construção do operador  $\mathcal{C}$  tem como objetivo resolver o problema das normas negativas da Eq. (3.41). Esse problema é análogo ao que Dirac enfrentou ao formular a equação de onda espinorial para a teoria quântica relativística, pois para cada estado com energia positiva havia também um estado com energia negativa (DIRAC, 1947). A solução para tal problema deu-se postulando a existência de antipartículas. As partículas e antipartículas se relacionam por meio do operador de conjugação de carga  $C$ . Similarmente, associaremos o operador  $\mathcal{C}$  à simetria adicional que está

associada ao fato de que existem números iguais de estados com norma positiva e negativa. O operador linear  $\mathcal{C}$ , que incorpora essa simetria, pode ser representado no espaço das coordenadas como uma soma sobre as autofunções  $\mathcal{PT}$ -normalizadas do hamiltoniano  $\mathcal{PT}$ -simétrico (3.14):

$$\mathcal{C}(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \psi_n(x) \psi_n(y). \quad (3.42)$$

Note que esta equação é idêntica a relação de completeza da Eq. (3.37), exceto pelo fator  $(-1)^n$ . Para entendermos melhor o papel do operador  $\mathcal{C}$ , iremos aplicá-lo no autovetor  $\psi_n(x)$ :

$$\langle x | \mathcal{C} | \psi_n \rangle = \int \langle x | \mathcal{C} | y \rangle \langle y | \psi_n \rangle dy = \int \mathcal{C}(x, y) \psi_n(y) dy, \quad (3.43)$$

como  $|y\rangle$  são autovetores do operador posição  $y$ , que é hermitiano, as relações de completeza são exatamente iguais àsquelas da mecânica quântica usual, logo:  $\int |y\rangle \langle y| dy = \mathbf{1}$ . Usando as equações (3.43) e (3.42), temos:

$$\langle x | \mathcal{C} | \psi_n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \int \psi_m(x) \psi_m(y) \psi_n(y) dy \quad (3.44)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \int \frac{(-1)^m}{(-1)^m} \psi_m(x) \psi_m(y) \psi_n(y) dy, \quad (3.45)$$

usando a relação de completeza (3.37), temos:

$$\langle x | \mathcal{C} | \psi_n \rangle = \int \frac{1}{(-1)^m} \delta(x - y) \delta_{m,n} \psi_m(y) dy \quad (3.46)$$

$$\langle x | \mathcal{C} | \psi_n \rangle = (-1)^n \psi_n(x) \quad (3.47)$$

$$\mathcal{C} | \psi_n \rangle = (-1)^n | \psi_n \rangle. \quad (3.48)$$

Esse novo operador  $\mathcal{C}$  se assemelha ao operador conjugação de carga na teoria quântica de campos. No entanto, o significado de  $\mathcal{C}$  está associado ao sinal da norma dos estados na mecânica quântica não-hermitiana  $\mathcal{PT}$ -simétrica. Os operadores  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{C}$  são raízes quadradas distintas do operador  $\delta(x - y)$ . Ou seja,  $\mathcal{P}^2 = \mathcal{C}^2 = \mathbf{1}$ , mas  $\mathcal{P} \neq \mathcal{C}$ , pois  $\mathcal{P}$  é real, enquanto que  $\mathcal{C}$  é complexo. Os operadores  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{C}$  não comutam, no entanto  $\mathcal{C}$  comuta com  $\mathcal{PT}$ .

Podemos agora criar um produto interno utilizando a condição  $H = H^{\mathcal{CPT}}$ , da mesma maneira que criamos o produto interno  $\mathcal{PT}$  (3.41):

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle_{\mathcal{CPT}} = \int [\psi_n(x)]^{\mathcal{CPT}} \psi_n(x) dx \quad (3.49)$$

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle_{\mathcal{CPT}} = \int [\mathcal{CPT} \psi_n(x)] \psi_n(x) dx \quad (3.50)$$

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle_{\mathcal{CPT}} = \delta_{n,m}. \quad (3.51)$$

Portanto, com a introdução do operador  $\mathcal{C}$  resolvemos o problema das normas negativas e temos um produto interno positivo definido.

- Unitariedade e Evolução Temporal

Para verificar a condição de unitariedade devemos notar primeiramente que:

$$H^{\mathcal{PT}} = \mathcal{PT}H(\mathcal{PT})^{-1} = H. \quad (3.52)$$

Aplicando  $\mathcal{PT}$  pela esquerda na equação de Schrödinger e usando o fato de que  $(\mathcal{PT})^{-1}\mathcal{PT} = \mathbf{1}$ , temos:

$$-i \frac{d}{dt} \mathcal{PT} |\psi(t)\rangle = \mathcal{PT} H (\mathcal{PT})^{-1} \mathcal{PT} |\psi(t)\rangle. \quad (3.53)$$

Para o caso de um sistema com simetria  $\mathcal{PT}$   $\langle \psi(t) | = (\mathcal{PT} |\psi(t)\rangle)^t$ , sendo que  $t$  representa a operação de transpor uma matriz, então transpondo os dois lados da equação acima temos:

$$-i \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | H^{\mathcal{PT}}. \quad (3.54)$$

Iremos agora analisar a evolução temporal da norma  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle_{\mathcal{PT}}$  a fim de verificar a condição de unitariedade:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle_{\mathcal{PT}} = \langle \psi(t) | \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_{\mathcal{PT}} + \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] |\psi(t)\rangle_{\mathcal{PT}}, \quad (3.55)$$

dessa forma:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle_{\mathcal{PT}} = -i [\langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle_{\mathcal{PT}} - \langle \psi(t) | H^{\mathcal{PT}} | \psi(t) \rangle_{\mathcal{PT}}] = 0, \quad (3.56)$$

portanto notamos que a norma dos estados não depende do tempo, garantindo assim a condição de unitariedade.

## 3.5 Algumas Aplicações da Mecânica Quântica Não-Hermitiana

Nesta seção mostraremos algumas aplicações da mecânica quântica não-hermitiana em diferentes problemas físicos. Serão apresentados alguns resultados para cadeias do tipo *tight-binding* em baixas dimensões. Tais resultados foram escolhidos por possuírem características em comum com o nosso trabalho, como por exemplo: transporte unidirecional, taxas de *hopping* assimétricas e cálculo do coeficiente de transmissão e reflexão de ondas.

### 3.5.1 Cadeias Lineares com Taxas de Hopping Assimétricas

Aqui serão apresentados e discutidos alguns resultados analíticos numéricos de (LONGHI et al., 2015) para uma rede *tight-binding* desordenada unidimensional com um campo de calibre imaginário, veja Figura 3.3a. O hamiltoniano que descreve o sistemas em estudo é:

$$H = \sum_n k_{n-1,n} |n-1\rangle \langle n| + k_{n,n-1} |n\rangle \langle n-1| + \sum_n V_n |n\rangle \langle n|, \quad (3.57)$$

sendo  $k_{n,n+1}$  e  $k_{n+1,n}$  antisimétricos (ou seja  $k_{n,n+1} \neq k_{n+1,n}$ ),  $|n\rangle$  é o estado de Wannier localizado no sítio  $n$  e  $V_n$  é a energia de Wannier do estado  $|n\rangle$ . Note que, a não-hermiticidade é introduzida por meio da assimetria das taxas de hopping.

A taxa de *hopping* é dada por:

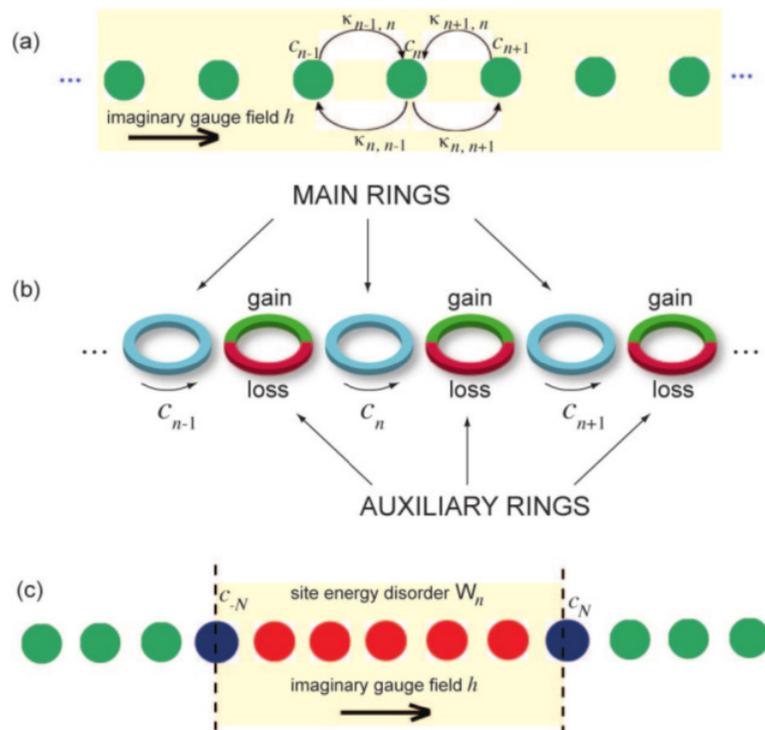
$$k_{n,n+1} = ke^{-h} \quad (3.58)$$

$$k_{n,n-1} = ke^h, \quad (3.59)$$

onde  $h > 0$  descreve o efeito de um potencial vetor imaginário e  $k$  é o termo de hopping na ausência do campo de calibre imaginário.

Realizações de hopping assimétrico estão presentes principalmente em óptica, com diferentes configurações, incluindo guias de ondas acopladas (LONGHI, 2014) e cadeia de microanéis ópticos ressonadores acoplados (LONGHI et al., 2015).

Figura 3.3: (a) Esquema de uma rede *tight-binding* com *hopping* assimétrico induzido por um campo de calibre imaginário  $h$ . (b) Realização óptica de uma rede não-hermitiana do modelo mostrado em (a) baseado no hopping do fóton acoplado a microanéis ressonadores. (c) Esquema de uma rede dupla homogênea e linear acoplada a uma rede de desordem e que está na presença de um campo de calibre imaginário  $h$ .



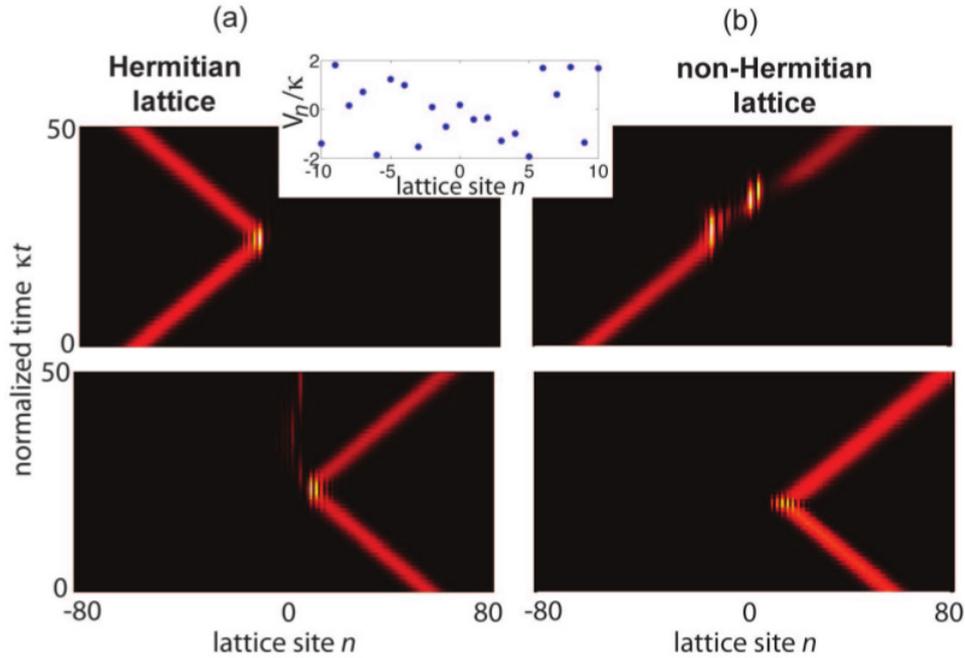
Fonte: Longhi et al., 2015.

A Figura 3.3b mostra uma possível implementação experimental de um campo de calibre imaginário  $h$  em uma cadeia de microanéis ópticos acoplados (LONGHI et al., 2015). A cadeia de ressonadores é composta por uma sequência de microanéis principais que são indiretamente acoplados usando um conjunto de microanéis auxiliares intercalados. Os anéis auxiliares são projetados para serem anti-ressonantes para os ressonadores dos anéis principais, isto é, o comprimento dos anéis de conexão é ligeiramente maior (ou menor) que os anéis principais, de modo a adquirir uma mudança de fase adicional. Para realizar um campo de calibre sintético e imaginário  $h$ , o anel auxiliar fornece amplificação no meio perímetro superior (amplificação de  $h$ ) e perda no semi-perímetro inferior (atenuação de  $h$ ).

A Figura 3.4 mostra a propagação de um pacote de onda gaussiano em uma rede

uniforme com desordem descrita pelo hamiltoniano da Eq. (3.57) para o caso de uma rede hermitiana ( $h = 0$ ) e não-hermitiana ( $h \neq 0$ ). Os painéis superiores referem-se à incidência pelo lado esquerdo, enquanto que os painéis inferiores referem-se à incidência pelo lado direito. Nota-se que o transporte robusto é obtido em oposição à desordem para o caso de uma rede não-hermitiana, no entanto, isso acontece apenas quando a onda incide pelo lado esquerdo.

Figura 3.4: Propagação de um pacote de onda gaussiano em uma rede uniforme com desordem (a)  $h = 0$  (rede hermitiana), e (b)  $h = 0.2$ . As energias  $V_n$  são retirados de uma distribuição uniforme na faixa de  $(-2k, 2k)$ . Os painéis superiores referem-se à incidência pelo lado esquerdo, enquanto que os painéis inferiores referem-se à incidência pelo lado direito.



Fonte: Longhi et al., 2015.

Os coeficientes de transmissão e reflexão para  $h = 0$  foram calculados através do método da matriz de transferência padrão (KOSTYRKO et al., 1999) (ver (LONGHI et al., 2015) para detalhes técnicos):

$$t_o(q) = \frac{2i \operatorname{sen}(q)}{P_{11} \exp(iq) - P_{22} \exp(-iq) + P_{12} - P_{21}} \exp[iq(2N + 1)] \quad (3.60)$$

$$r_o(q) = \frac{Q_{22} - Q_{11} + Q_{21} \exp(-iq) - Q_{12} \exp(iq)}{Q_{11} \exp(iq) - Q_{22} \exp(-iq) + P_{12} - P_{21}} \exp[iq(2N + 1)], \quad (3.61)$$

sendo:

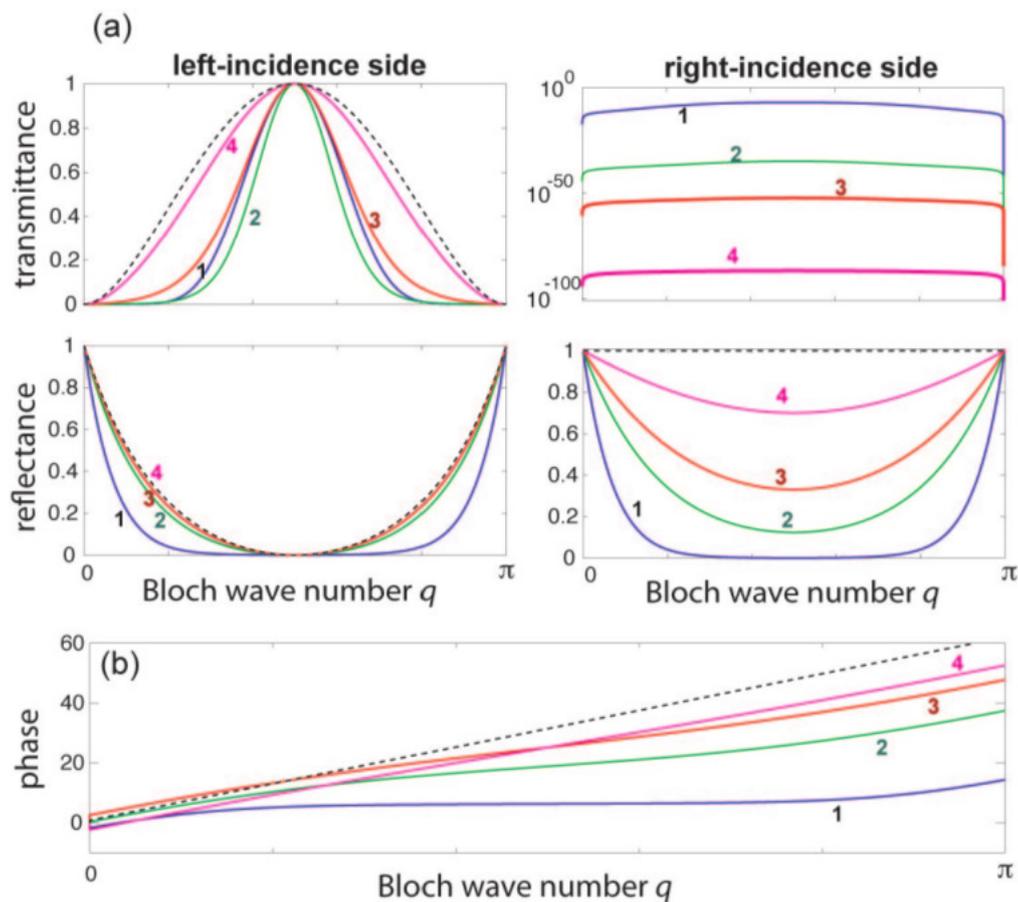
$$Q(q) = M_N \times M_{N-1} \times \dots \times M_{-N}, \quad (3.62)$$

$$P(q) = M_{-N} \times M_{-N+1} \times \dots \times M_N, \quad (3.63)$$

$$M_n(q) = \begin{pmatrix} 2 \cos(q) - V_n/k & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

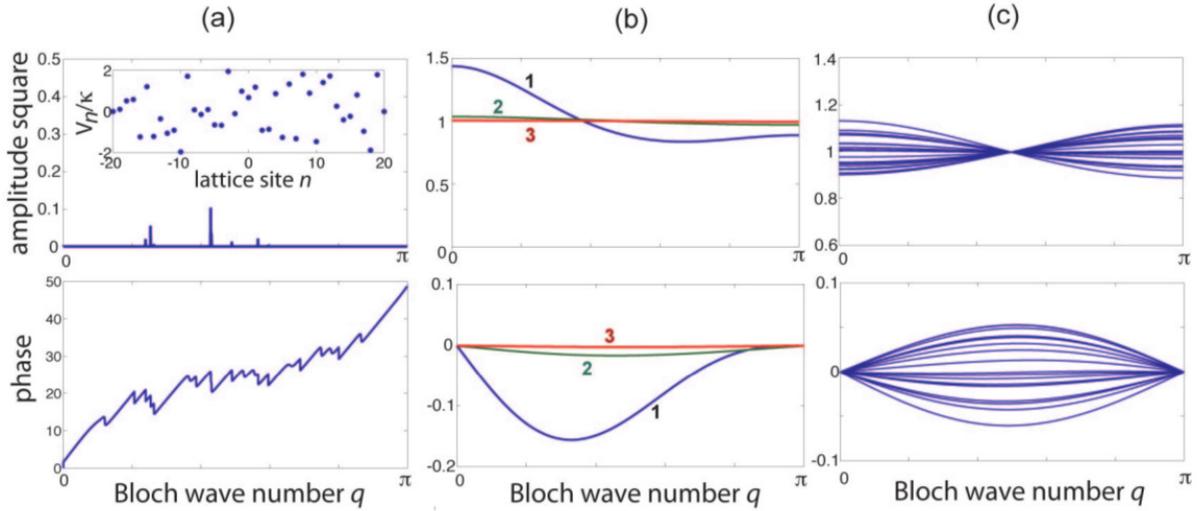
e  $q$  é o número de onda de Bloch.

Figura 3.5: (a) Transmitância espectral  $|t^{(l,r)}(q)|^2$  calculada numericamente e refletância  $|r^{l,r}(q)|^2$  de uma rede dupla homogênea e linear acoplada a uma rede ( $N = 10$ ) e que está na presença de um campo de calibre imaginário, para incidência pela direita e pela esquerda na, na ausência de desordem. (b) As diferentes curvas referem-se a valores crescentes do campo de calibre  $h$ . Curva 1:  $h = 0.2$ ; curva 2:  $h = 1$ ; curva 3:  $h = 1.5$ ; curva 4:  $h = 2.5$ . As curvas tracejadas mostram os comportamentos da transmitância espectral e refletância no limite  $h \rightarrow \infty$ . (b) Comportamento da fase da transmitância espectral  $t^{(l)}(q)$ .



Fonte: Longhi et al., 2015.

Figura 3.6: Transmissão espectral  $t(q)$  calculada numericamente (amplitude quadrada e fase) para a incidência do lado esquerdo em uma rede uniforme com desordem da energia on-site nos sites  $-N \leq n \leq N$  com  $N = 20$  para (a)  $h = 0$  (rede hermitiana) e (b) para alguns valores crescentes do campo de calibre  $h$  (curva 1:  $h = 3$ , curva 2:  $h = 5$ , curva 3:  $h = 7$ ). As energias  $V_n$  são tiradas de uma distribuição uniforme na faixa  $(-2k, 2k)$ . O painel (c) mostra a transmissão espectral calculada numericamente (amplitude quadrada e fase) para  $h = 5$  e para 20 realizações diferentes da desordem de rede.



Fonte: Longhi et al., 2015.

Na presença de desordem e para valores suficientemente grandes de  $N$ :  $t_o(q) \rightarrow 0$  e  $r_o(q) \rightarrow 1$ , devido à localização de Anderson, veja por exemplo a Figura 3.6a. Na presença do campo de calibre imaginário ( $h \neq 0$ ) um cenário completamente diferente é encontrado.

Os coeficientes de transmissão e reflexão são agora dados por:

$$t(q) = t_o(q - ih), \quad (3.65)$$

$$r(q) = \exp(-2Nh)r_o(q - ih). \quad (3.66)$$

No limite de um campo imaginário grande, ou seja,  $h \rightarrow \infty$ , temos que:  $t(q) \rightarrow 1$  e  $r(q) \rightarrow 0$  (ver (LONGHI et al., 2015)). Isso mostra que, para um campo de calibre suficientemente grande, a propagação do pacote de onda não é afetada pela desordem ou imperfeições da rede, ou seja, transparência não-hermitiana unidirecional é obtida.

Esse fenômeno é ilustrado nas Figuras 3.6b e 3.6c. Observe que, de acordo com a análise assintótica, a medida que  $h$  é aumentado, a rede torna-se transparente e a transmissão espectral tende a 1.0. A figura mostra claramente que a transmissão é quase insensível à desordem da rede. Um comportamento totalmente oposto é encontrado quando consideramos uma onda que se propaga no sentido contrário, como mostrado nas Figuras 3.4b e 3.6a. Uma análise detalhada pode ser encontrada em (LONGHI et al., 2015).

Foram mostrados, até aqui, os resultados para uma rede infinitamente estendida com um campo de calibre imaginário estendido ao longo de toda a rede, tanto na região ordenada como nas desordenadas. No entanto, para um sistema mais realista, deseja-se aplicar o campo de calibre imaginário a uma região espacial limitada da rede, região desordenada, com o objetivo de evitar a localização de Anderson e suprimir o impacto da desordem na transmissão. Dessa forma, serão apresentados agora os resultados para uma heteroestrutura dupla: uma rede não-hermitiana com desordem embutida entre duas redes hermitianas homogêneas, veja Figura 3.3c. O hamiltoniano da heteroestrutura é o mesmo descrito pela Eq. (3.57) com:

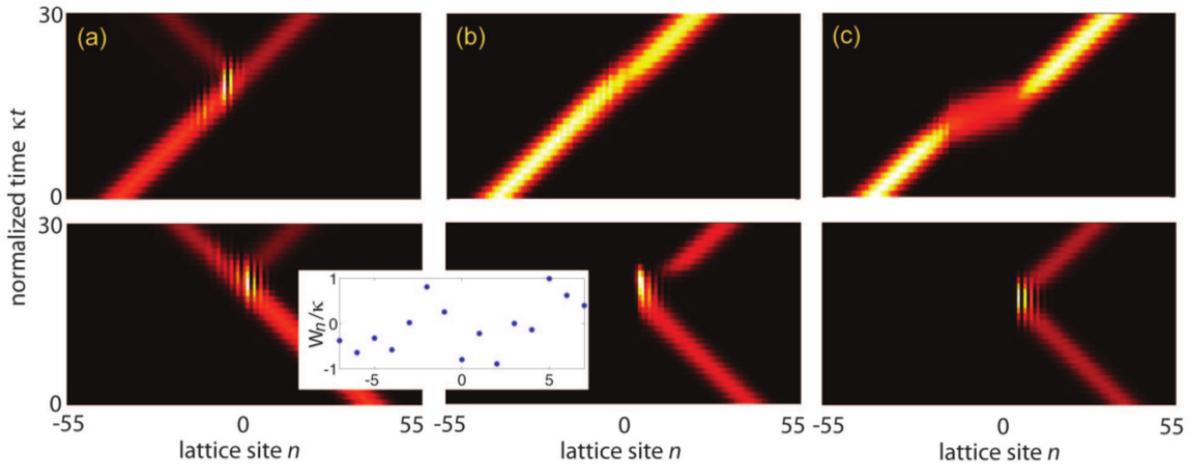
$$\begin{aligned} k_{n,n+1} &= k_{n+1,n} = k, & n \leq -N - 1, n \geq N \\ k_{n,n+1} &= k \exp(-h), & -N \leq n \leq N - 1 \\ k_{n,n-1} &= k \exp(-h), & -N + 1 \leq n \leq N. \end{aligned} \quad (3.67)$$

A energia on-site  $V_n$  é assumida uniforme e igual a zero nas regiões hermitianas, enquanto que na região não-hermitiana:

$$V_n = -iS + W_n. \quad (3.68)$$

Na equação acima  $S$  fornece um caráter complexo para a energia potencial on-site e  $W_n$  é um parâmetro real para a desordem e imperfeições da rede. Os coeficientes de transmissão e reflexão são calculados de modo análogo ao caso de uma rede infinitamente estendida com um campo de calibre imaginário estendido ao longo de toda a rede.

Figura 3.7: Propagação de um pacote de ondas gaussiano na heteroestrutura com desordem para (a)  $h = 0$  (limite hermitiano), (b)  $h = 0.5$  e (c)  $h = 2$ . As energias  $W_n$  nos sítios  $-N < n < N$  (com  $N = 8$ ) são obtidas da partir de uma distribuição uniforme na faixa  $(-k, k)$ . Os painéis superiores referem-se à incidência pelo lado esquerdo, enquanto que os painéis inferiores à incidência pelo lado direito.



Fonte: Longhi, 2014.

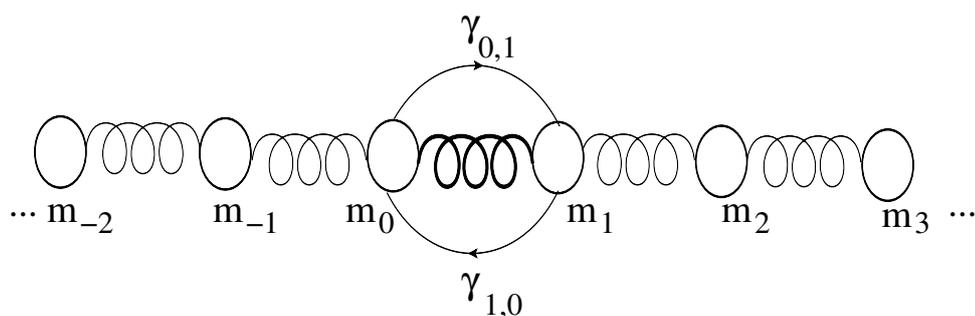
A Figura 3.6a mostra o comportamento da transmissão e reflexão para valores crescentes de  $h$  na ausência de desordem ( $W_n = 0$ ). A figura mostra claramente que a transmissão na heteroestrutura é altamente não-recíproca.

O impacto da desordem na região de acoplamento das redes é mostrado na Figura 3.7. Observe que o impacto da desordem é totalmente desprezível. A transparência unidirecional também é obtida para um pacote de ondas gaussiano que atravessa a heteroestrutura também é obtida (Figuras 3.7b e 3.7c), enquanto que para  $h = 0$  a transmissão é evitada para ambos os lados de incidência (Figura 3.7a)

### 3.5.2 Análogo Clássico: Cadeia de Massa-Mola Acopladas com Interação Não-Recíproca

Uma das leis fundamentais da física clássica é a lei da ação e reação ou terceira lei de Newton. Esta lei, afirma que quando dois corpos interagem, a força que cada corpo exerce sobre o outro são sempre iguais em módulo, possuem mesma direção e sentidos opostos. Ou seja, a interação entre as partículas é recíproca (ISRAELACHVILI, 1992; DIJKSTRA et al., 2000; PRAPROTNIK, 2008). No entanto, existem várias situações nas quais a terceira lei de Newton é violada. Geralmente essa quebra de simetria ocorre para partículas mesoscópicas quando suas interações efetivas são mediadas em um meio fora do equilíbrio (HAYASHI e SASA; 2206; BUENZLI e SOTO,2008). Temos como exemplo, um sistema composto por diferentes tipos de partículas e sua interação com o meio ambiente se dá fora do equilíbrio, ou quando o meio se move em relação às partículas (É claro que a terceira lei de Newton é válida se consideramos o sistema completo de partículas mais meio). Recentemente, uma gama de trabalhos têm estudado interações não-recíprocas na escala de comprimento mesoscópico. Os exemplos incluem forças óticas (SHANBLATT e GRIER, 2011; DHOLAKIA e ZEMANEK; 2010), interações efetivas entre partículas coloidais sob fluxo solvente ou deferente (DZUBIELLA et al., 2003; SRIRAM e FURST, 2012), e as chamadas“forças sociais” (HELBING e MOLNAR, 1995) que governam, por exemplo, a dinâmica dos pedestres.

Figura 3.8: Representação esquemática de uma cadeia de massas-mola acopladas com assimetria introduzida por meio de taxas desiguais para as constantes elásticas entre duas massas localizadas no centro da rede.



Fonte: Autor, 2018.

Nesse contexto, estudaremos aqui o análogo clássico dos exemplos de redes cristalinas com interação não-recíproca. Usando o fato de que o elétron numa rede cristalina unidimensional se comporta de maneira análoga a uma partícula clássica sob influência de um potencial anarmônico, iremos estudar um sistema que consiste em uma cadeia de  $N$  massas acopladas por molas de constante elástica  $\gamma$ , consideraremos ainda que o sistema viola a terceira lei de Newton, tal violação dá-se devido a presença de um defeito na rede: a constante elástica da mola que acopla a massa  $m_0$  e  $m_1$  ( $\gamma_{0,1}$ ) possui um valor diferente da constante elástica da mola que une a massas  $m_1$  e  $m_0$  ( $\gamma_{1,0}$ ), ou seja,  $\gamma_{0,1} \neq \gamma_{1,0}$ . Na Figura 3.8 mostramos a representação esquemática da cadeia de massas-mola acopladas com um defeito central não-recíproco.

A equação de movimento para a  $n$ -ésima massa é dada por:

$$m_n \frac{d^2 x_n(t)}{dt^2} = -\gamma_{n,n+1}[x_n(t) - x_{n+1}(t)] - \gamma_{n,n-1}[x_n(t) - x_{n-1}(t)]. \quad (3.69)$$

O enfoque principal desta seção é o estudo as propriedades de transmissão na cadeia quando uma onda plana com número de onda  $q$  é inserida na cadeia. Por simplicidade consideraremos que todas as massas são iguais ( $m_n = m$ ) e as constantes elásticas que acoplam todas as massas também possuem o mesmo valor  $\gamma$ , exceto na região do defeito onde:  $\gamma_{0,1} = Ae^\varepsilon$  e  $\gamma_{1,0} = Ae^{-\varepsilon}$ , sendo  $\varepsilon$  o fator que controla a assimetria referente às constantes de mola na região do defeito. A Eq. (3.69) tem solução estacionária do tipo  $x_n(t) = x_n e^{-iE(k)t}$ , sendo  $k$  o número de onda da onda plana inserida na cadeia e  $E^2 = \frac{1}{m}[2\gamma - \gamma(e^{ik} + e^{-ik})]$  é a relação de dispersão de energias na região fora do defeito, com isso temos:

$$-mE^2 x_n = -\gamma_{n,n+1}[x_n - x_{n+1}] - \gamma_{n,n-1}[x_n - x_{n-1}]. \quad (3.70)$$

Quando uma onda plana é inserida na cadeia pelo lado esquerdo, sofrerá um espalhamento devido ao defeito. Dessa maneira surgirão ondas refletida e transmitida. Levando em consideração as condições de contorno do problema, podemos escrever as soluções da Eq. (3.70) para uma onda inserida pelo lado esquerdo, como:

$$x_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 0 \\ T e^{ikn}, & n \geq 1 \end{cases}, \quad (3.71)$$

sendo  $R_0$ ,  $R$  e  $T$  as amplitudes das ondas incidente, refletida e transmitida, respectivamente. Para estudarmos as propriedades de transmissão do presente sistema devemos relacionar as amplitudes das ondas incidente e transmitida a fim de encontrarmos uma equação para o coeficiente de transmissão, definido por  $t \equiv |T|^2/|R_0|^2$ . Para isso, iremos escrever a Eq. (3.70) para a região do defeito. Para a massa  $m_0$ , obtemos:

$$(mE^2 - \gamma_{0,1} - k)x_0 = -\gamma_{0,1}x_1 - \gamma x_{-1}, \quad (3.72)$$

e para  $m_1$ :

$$(mE^2 - \gamma_{1,0} - \gamma)x_1 = -\gamma x_2 - \gamma_{1,0}x_0. \quad (3.73)$$

Depois de um pouco de álgebra obtemos uma expressão para o coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$ :

$$\begin{aligned} t_L(k, |R_0|^2) &\equiv \frac{|T|^2}{|R_0|^2} \\ &= \frac{4\gamma^2\gamma_{1,0}^2 \text{sen}^2(k)}{4\gamma^4 + 4k^2 \cos^2(k) - 8\gamma^4 \cos(k) - 4k^3(\gamma_{1,0} + \gamma_{0,1})(1 - \cos(k))^2 + 2\gamma^2(\gamma_{1,0} + \gamma_{0,1})^2(1 - \cos(k))} \end{aligned} \quad (3.74)$$

Procedendo de modo análogo podemos calcular também o coeficiente de reflexão:

$$\begin{aligned} r(k, |R_0|^2) &\equiv \frac{|R|^2}{|R_0|^2} \\ &= \frac{4\gamma^2\gamma_{1,0}^2 \text{sen}^2(k)}{\gamma^4 - 2\gamma^3\gamma_{0,1} + \gamma^2\gamma_{0,1}^2 + \{[\gamma(\gamma_{1,0} + \gamma_{0,1}) - 2\gamma^2]^2(1 - 2\cos(k))\} + 2\cos(2k)(\gamma^2 - \gamma\gamma_{1,0})(\gamma^2 - \gamma\gamma_{0,1})} \end{aligned}$$

Note que quando  $\gamma_{1,0} = \gamma_{0,1}$  e  $A = 1.0$  (ausência do defeito), temos que  $t(k, |R_0|^2) = 1$  e  $r(k, |R_0|^2) = 0$  para qualquer valor de  $k$ , como esperado.

Para uma onda inserida pelo lado oposto (lado direito), as equações para os coeficientes de transmissão e reflexão são bem parecidas com as Eqs. (3.74) e (3.75), basta trocarmos  $\gamma_{0,1}$  por  $\gamma_{1,0}$ . Para melhor caracterizarmos a possibilidade de assimetria na

transmissão das ondas inseridas pela esquerda e pela direita, estudaremos o comportamento do coeficiente de refração, definido por:

$$f_t(k, |R_0|^2) \equiv \frac{t_L(k, |R_0|^2) - t_R(k, |R_0|^2)}{t_L(k, |R_0|^2) + t_R(k, |R_0|^2)}, \quad (3.76)$$

sendo  $t_L$  e  $t_R$  o coeficiente de transmissão das ondas incidentes na cadeia através do lado esquerdo e direito, respectivamente. Desse modo, temos:

$$f_t = \frac{\gamma_{1,0}^2 - \gamma_{0,1}^2}{\gamma_{1,0}^2 + \gamma_{0,1}^2}, \quad (3.77)$$

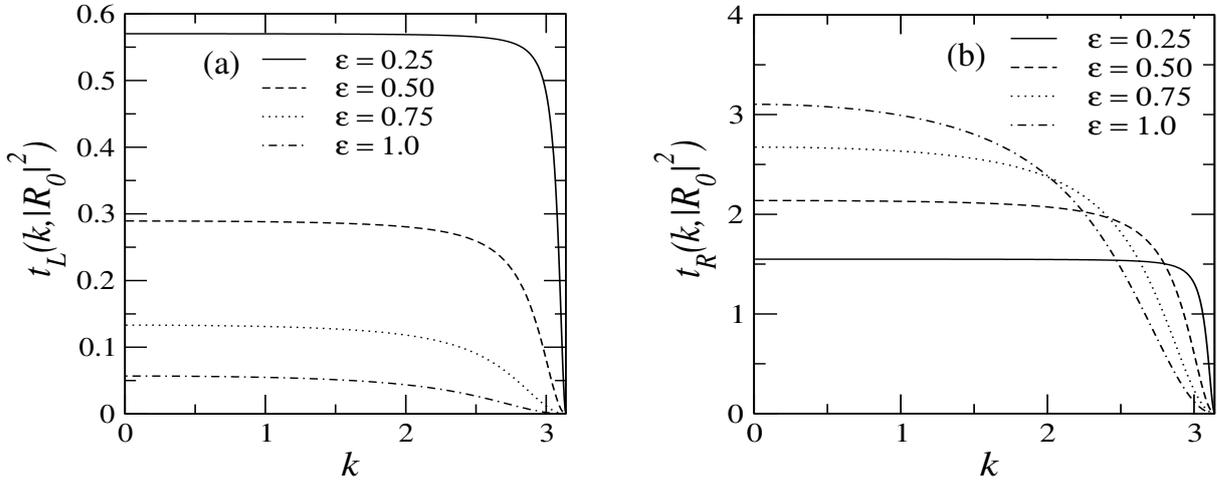
sendo  $\gamma_{1,0}$  a constante elástica da mola que acopla a massa  $m_1$  à  $m_0$  e  $\gamma_{0,1}$  é o valor da constante elástica que acopla  $m_0$  à  $m_1$ . Note que o fator de refração é um número que só depende dos valores das constantes elásticas.

Iremos agora apresentar um estudo mais detalhado das propriedades de transmissão para uma cadeia de massas-mola que viola a terceira lei de Newton (ver Figura 3.8), tal violação é introduzida por meio de taxas desiguais para as constantes elásticas entre duas massas localizadas no centro da rede ( $\gamma_{0,1} \neq \gamma_{1,0}$ ). Investigaremos a possibilidade de obtermos de transporte assimétrico através da cadeia devido à quebra de simetria.

Foram realizadas simulações para valores distintos de  $k$ ,  $A$  e  $\varepsilon$ , aqui serão mostrados apenas alguns resultados representativos. Em todas as análises que serão mostradas a seguir consideramos  $\gamma$  e  $A$  fixos, e iguais à unidade.

Na Figura 3.9, mostramos o coeficiente de transmissão como função do número de onda  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ . Para o caso de uma onda plana incidindo pelo lado esquerdo, Figura 3.9a, observamos que à medida que o coeficiente  $\varepsilon$  aumenta, a transmissão diminui, chegando a um valor bem próximo de zero para  $\varepsilon = 1.0$ . Já para o caso de onda plana proveniente do lado direito (Figura 3.9b), observamos um comportamento inverso, a transmissão aumenta com o aumento da assimetria ( $\varepsilon$ ). Vale salientar que para todos os valores de  $\varepsilon$  a transmissão é maior que a unidade, indicando um ganho intrínseco no sistema oriundo da violação da terceira lei de Newton. Para ambos os lados de incidência observamos que a transmissão é praticamente constante para uma enorme faixa do espectro.

Figura 3.9: Coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . (a) Incidência pelo lado esquerdo; (b) incidência pelo lado direito. Transmissão não-recíproca é alcançada.

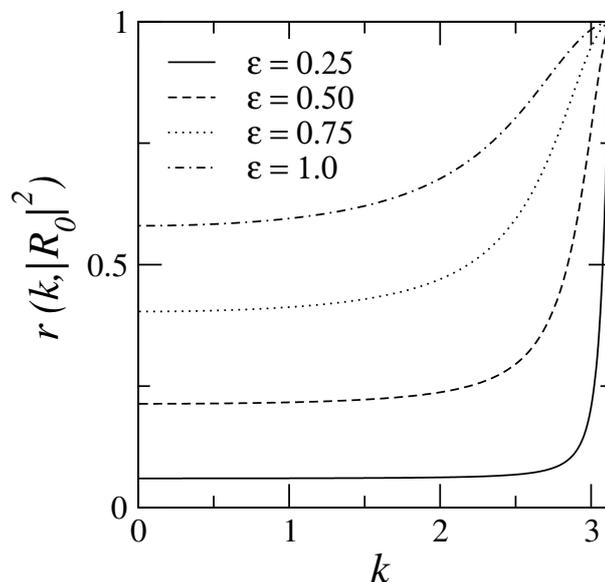


Fonte: Autor, 2018.

Na Figura 3.10, plotamos o coeficiente de reflexão  $r$  como função do número de onda  $k$  para uma onda incidente vindo do lado esquerdo. Plotamos o coeficiente de transmissão apenas para uma onda inserida pela esquerda, pois para ambos os casos de incidência o comportamento do coeficiente de reflexão é exatamente o mesmo, ou seja, apesar da quebra da assimetria a reflexão permanece recíproca. Isso pode ser verificado analisando a Eq. (3.75), pois  $r$  só depende do quadrado de  $\gamma_{1,0}$  e  $\gamma_{0,1}$ . Os valores para o coeficiente de reflexão aumentam conforme  $\varepsilon$  aumenta.

Observamos na Figura 3.9 um espécie de ganho no sistema, quando a onda incide através do lado direito. Para melhor caracterizarmos a possibilidade de ganho e perda analisaremos a intensidade relativa total das ondas espalhadas  $t+r$  para valores distintos do parâmetro de assimetria  $\varepsilon$ . Na Figura 3.11 apresentamos os gráficos de  $t+r$  em função do número de onda da onda incidente para incidência pela esquerda (Figura 3.11a) e pela direita (Figura 3.11b), observamos que para incidência pela esquerda o sistema sofre uma perda pois  $t+r < 1$  para todos os valores de  $\varepsilon$ , exceto para o caso em que  $k = \pi$ , onde não temos nem perda, nem ganho, pois  $t+r = 1$ . Já para uma onda incidindo pela direita  $t+r \geq 1$ , caracterizando assim um ganho no sistema.

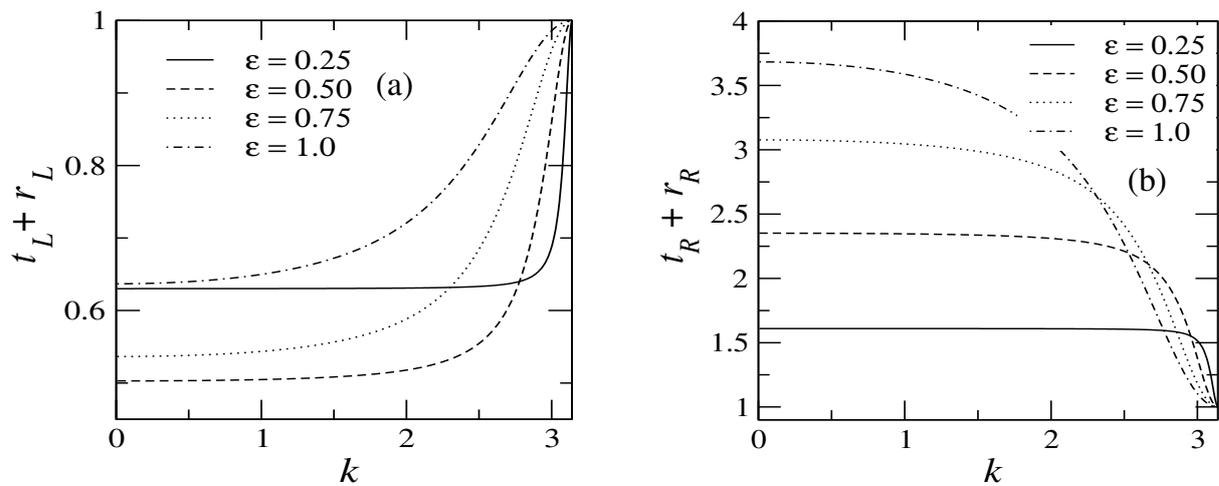
Figura 3.10: Coeficiente de reflexão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ .



Fonte: Autor, 2018.

Diante do que foi mostrado nesta seção, podemos afirmar que a violação da terceira lei de Newton provoca um transporte não-recíproco robusto numa cadeia de massas-mola acopladas, podendo ser controlado variando os parâmetros associados à assimetria.

Figura 3.11: Intensidade relativa total da onda espalhada (transmitida e refletida) como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$  e  $\gamma = A = 1.0$ . (a) Uma onda plana proveniente do lado esquerdo exibe perda de energia ( $t + r < 1$ ) para uma cadeia de massa-mola com acoplamento não-recíproco. (b) O ganho ( $t + r > 1$ ) ocorre para o caso de incidência pelo lado direito.



Fonte: Autor, 2018.

## 4

# NÃO-LINEARIDADE

Muitos fenômenos físicos ocorrem devido a efeitos não-lineares, ao que parece a natureza insiste em ser não-linear; podemos citar inúmeros exemplos como as ondulações de uma bandeira ao vento, o gotejamento de uma torneira vazando e as oscilações de um pêndulo duplo (MARION e THORNTON, 2011). Ao estudarmos determinados sistemas em física, consideramos que o comportamento deste é linear. No entanto, essa hipótese é quase sempre uma aproximação, que é válida apenas dentro de um intervalo limitado de valores. Dessa forma, surge a necessidade de estudar o efeito da não-linearidade nos mais diversos tipos de sistemas. Além da importância teórica do estudo dos efeitos não-lineares, há também um grande interesse dos cientistas no estudo da não-linearidade devido à sua gama de aplicabilidades tecnológicas no desenvolvimento de inúmeros dispositivos, principalmente na área de fotônica, óptica, eletrônica e computação.

Um sistema é dito não-linear quando a combinação de suas soluções não é uma solução, ou seja, nessa classe de sistemas não é válido o princípio da superposição. Tal fato torna as equações que descrevem e caracterizam o sistema bastante difíceis de serem solucionadas analiticamente, sendo necessário, na maioria dos casos, a implementação numérica do problema.

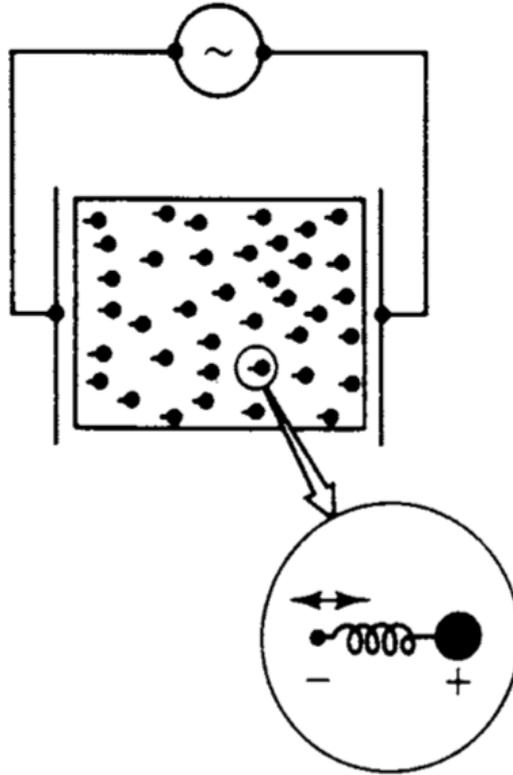
A seguir estudaremos com mais detalhes os efeitos não-lineares em sistemas ópticos e eletrônicos.

## 4.1 Não-Linearidade em Sistemas Ópticos

Em óptica, estamos interessados em estudar a interação da luz com a matéria. Em nossa experiência diária, as intensidades de luz que observamos são relativamente baixas. Nesse contexto, as propriedades ópticas não dependem da intensidade luminosa. Se as ondas luminosas são capazes de penetrar e atravessar um determinado meio, isso ocorre sem que haja interação entre as ondas. No entanto, para intensidades de luz suficientemente altas o cenário muda. É observado uma dependência das propriedades ópticas em relação à intensidade luminosa, bem como uma interação entre as ondas luminosas. É exatamente este o domínio da óptica não-linear. Como os fenômenos não-lineares presentes na óptica não fazem parte do nosso cotidiano, pois só aparecem para intensidades de luz muito altas, sua descoberta e estudo só foi possível após a invenção do laser (COTTER e BUTCHE, 1990). O estudo do comportamento não-linear da luz fornece uma visão da estrutura e das propriedades da matéria, sendo utilizado principalmente para o desenvolvimento de dispositivos ópticos e técnicas de grande importância em vários ramos da ciência.

Os materiais que nos interessam em óptica são compostos por partículas carregadas: elétrons e os núcleos de íons. Quando aplicamos um campo elétrico, as cargas elétricas se movem; as cargas positivas tendem a se mover na direção do campo, enquanto as negativas na direção contrária. Nos materiais condutores, algumas partículas carregadas são livres para se mover através do material na presença do campo elétrico. Já em materiais dielétricos, as partículas carregadas são ligeiramente deslocadas de suas posições iniciais. Este pequeno movimento de cargas positivas em uma direção e negativas em outra resulta em um conjunto de dipolos elétricos induzidos. Em outras palavras, a presença do campo elétrico em meios dielétricos induz uma polarização. O movimento de partículas em um meio dielétrico, é portanto oscilatório, formando dipolos oscilantes (ver Figura 4.1). Como a massa dos núcleos é bem maior que a massa dos elétrons, para altas frequências ópticas (ultravioleta e visível), o movimento do elétron é o mais significativo. O comportamento do elétron na presença de um campo elétrico é análogo ao de uma partícula em um potencial anarmônico. Diante disso, vamos fazer uma analogia com a mecânica clássica: vamos supor que o elétron de massa  $m$  e carga  $-e$  está ligado ao íon por

Figura 4.1: Representação esquemática do movimento de cargas em um material dielétrico sujeito a um campo elétrico alternado na frequência de luz visível. O movimento dos íons é insignificante se comparado ao movimento dos elétrons.



Fonte: David Cotter, Paul N. Butcher, 1990

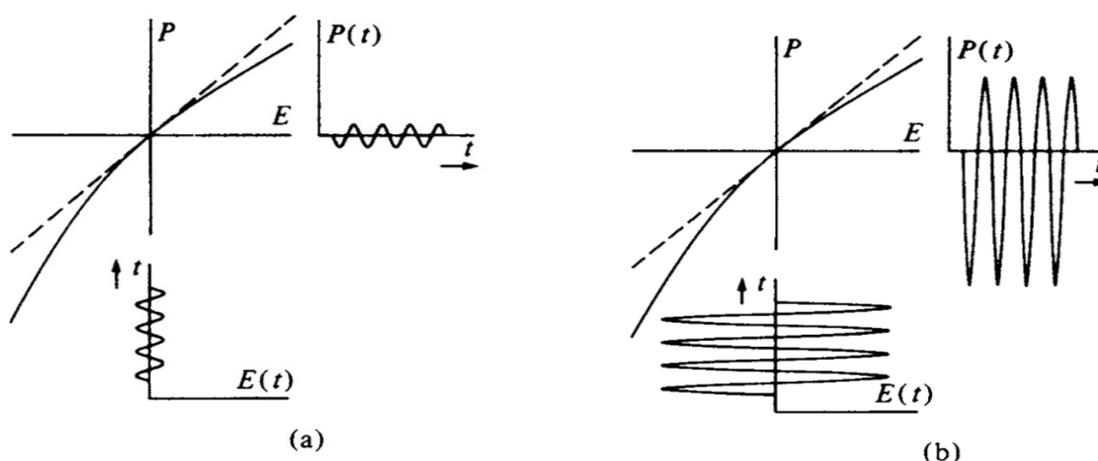
uma mola, como mostrado na Figura 4.1. Por simplicidade, vamos considerar o caso em que todos os dipolos estão orientados na mesma direção do campo. A posição do elétron depende da intensidade do campo elétrico  $E(t)$ , sendo descrita por meio da equação de movimento para um oscilador:

$$m \left[ \frac{d^2x}{dt^2} + 2\Gamma \frac{dx}{dt} + \Omega^2 x - (\xi^2 x^2 + \xi^3 x^3 + \dots) \right] = -eE(t), \quad (4.1)$$

sendo  $x$  o deslocamento da posição média,  $\Omega$  é a frequência de ressonância e  $\Gamma$  é uma constante de amortecimento, já o termo do lado direito representa a força exercida sobre o elétron devido à presença do campo elétrico aplicado o qual provoca as oscilações. O movimento das partículas carregadas em um meio dielétrico na presença de um campo elétrico só pode ser considerado linear apenas se o deslocamento  $x$  for pequeno. Para valores maiores do deslocamento a força restauradora é não-linear em termos de  $x$ , fazendo

analogia mais uma vez com a mecânica clássica, isso é equivalente a mola ser distorcida devido a uma grande compressão ou expansão. A não-linearidade é representada na equação acima pelos termos  $m(\xi^2 x^2 + \xi^3 x^3 + \dots)$ , sendo  $\xi^2, \xi^3, \dots$  constantes. Na Figura 4.2, é mostrado como um comportamento anarmônico dá origem a uma polarização induzida que pode ser considerada linear (como uma boa aproximação) ou fortemente não-linear, dependendo da magnitude do campo elétrico aplicado.

Figura 4.2: O efeito de uma dependência não-linear da polarização  $P$  com o campo elétrico  $E$  é mostrada. Para campos pequenos (a)  $P$  não se afasta significativamente de uma dependência linear (linha tracejada). Para campos intensos (b), a polarização tem uma forma de onda distorcida a qual contém componentes significativas nas frequências harmônicas.



Fonte: David Cotter, Paul N. Butcher, 1990

## 4.2 Não-Linearidade em Sistemas Eletrônicos

Os modelos que descrevem sólidos cristalinos estudados no capítulo 2 consideram que os íons dos sólidos cristalinos permanecem fixos nos sítios da rede de Bravais. Apesar dessa aproximação ser bastante distante do comportamento real de um sólido, sabemos que muitas previsões, usando esse modelo, são satisfatórias. No entanto, para obter uma descrição dos sólidos ainda mais fiel, é necessário adicionar ao hamiltoniano, que descreve a dinâmica do sistema, termos devido ao movimento dos íons. Uma aproximação usualmente feita é a aproximação de pequenas oscilações: admite-se que apesar de os íons

não estarem rigidamente confinados às suas localizações de equilíbrio (sítio da rede de Bravais), seus deslocamentos em relação às localizações de equilíbrio são pequenos. Essa suposição é bastante razoável para a maioria dos sólidos (com exceção do hélio sólido) em temperaturas muito abaixo do ponto de fusão (ASHCROFT E MENMIN, 1976).

Há ainda muitos fenômenos físicos que ocorrem em sólidos que só podem ser explicados considerando a presença de não-linearidade no sistema, pois esses fenômenos devem-se inteiramente aos termos de ordem superior à unidade na energia de interação iônica em torno de seu valor de equilíbrio (ASHCROFT E MENMIN, 1976). Como exemplo desses fenômenos podemos citar a expansão térmica: em um cristal harmônico, o tamanho do equilíbrio não dependeria da temperatura (KITTEL, 2005). Outro exemplo consiste no fato de que a condutividade térmica de um sólido isolante é limitada no modelo de um cristal perfeito apenas devido aos termos não-lineares na energia de interação iônica, caso contrário, a condutividade térmica seria infinita. Esta é uma das mais importantes propriedades de transporte devido à presença dos termos não-lineares na energia, mas a não-linearidade também tem papel essencial em quase todos os processos pelos quais as vibrações da rede transmitem energia (fônons).

Qualquer teoria, por mais simples que seja, ao considerar os modos vibracionais da rede, deve considerar também a existência de um conjunto de elétrons que não estão rigidamente ligados aos níveis mais internos dos íons, esses elétrons são comumente chamados de elétrons de condução. Surge então a necessidade de estudar a interação entre os elétrons de condução e as vibrações da rede em sólidos, denominada interação elétron-fônon, tal interação também é não-linear e apresenta enorme complexidade (ECKART, 1934; BORN e OPPENHEIMER, 1927). Uma consequência dessa interação é a possibilidade de localização do pacote de onda eletrônico (KENKRE e CAMPBELL, 1986; HOLSTEIN, 1959, DAVYDOV, 1973), através do fenômeno de self-trapping ou auto-armadilhamento.

Uma técnica bastante utilizada e particularmente simples para o estudo da não-linearidade em redes cristalinas é a equação não-linear discreta de Schrödinger, que estudaremos de forma mais detalhada na próxima seção.

### 4.2.1 Equação Discreta Não-linear de Schrödinger

Como vimos na seção anterior, o papel da não-linearidade é fundamental no estudo dos fenômenos de transporte eletrônico, dentre esses fenômenos destacamos a interação entre os fônons da rede e os elétrons. Diante disso, surge a necessidade de obter métodos para estudar os efeitos que surgem no sistema na presença da não-linearidade. Um método muito difundido e bastante eficaz para atingir o objetivo citado acima é o uso da equação discreta não-linear de Schrödinger (DNLS) (HENNIG e TSIRONIS, 1999):

$$i \frac{d\psi_n(t)}{dt} = V_n \psi_n(t) - \gamma(\psi_{n-1}(t) + \psi_{n+1}(t)) + \alpha |\psi_n(t)|^2 \psi_n(t), \quad (4.2)$$

Por meio da equação DNLS na forma acima é possível descrever o movimento de um elétron se propagando em um cristal unidimensional, interagindo com um elétron ou movendo-se por ele, onde o índice  $n$  percorre todos os sítios da rede ( $n = 1, \dots, N$ ),  $\psi_n$  é a função de onda do elétron no  $n$ -ésimo sítio da rede,  $V_n$  está associado a energia potencial *on-site*,  $\gamma$  e a taxa de *hopping* entre os sítios (considerando apenas os primeiros vizinhos) e  $\alpha$  é o parâmetro que controla a não-linearidade do sistema (interação elétron-fônon).

A equação DNLS tem uma longa e interessante história; a sua forma independente do tempo foi obtida primeiramente por Holstein em seu estudo do problema de um polaron (HOLSTEIN, 1959). Mais tarde Davydov desenvolveu a forma dependente do tempo em seus estudos de transferência de energia em proteínas por meio de solitons (DAVYDOV e KISLUKHA, 1973). O termo soliton, que é usado para descrever modos elásticos intrínsecos da rede que viajam de forma “solitária” ao longo de uma cadeia não-linear, foi criado por Zabusky e Kruskal a cerca de 50 anos. Esses autores não foram os primeiros a notar as notáveis propriedades das ondas solitárias, cuja primeira descrição conhecida na literatura surge como “uma grande elevação solitária de água arredondada, lisa e bem definida”, remonta à observação histórica feita em um canal perto de Edimburgo por John Scott Russell na década de 1830. No curso das quase cinco décadas que se passaram desde a publicação do trabalho de Zabusky e Kruskal (1965), os estudos teóricos e experimentais dos solitons tiveram um enorme crescimento, chamamos atenção também para a gama de suas aplicações em diversos ramos da ciência, principalmente no desenvolvimento da comunicação totalmente óptica (ABLOWITZ e CLARKSON, 1991). Eilbeck, Lomdahl

e Scott estudaram um fenômeno muito importante no âmbito de sólidos cristalinos que é o fenômeno de *self-trapping* da onda, usando equações DNLS para modelar o sistema (SCOTT et al., 1985). Esse fenômeno ocorre quando o parâmetro  $\alpha$  que controla a não-linearidade do sistema supera um determinado valor, então o pacote de onda presente na rede não mais consegue se propagar, ficando confinada a uma região próxima ao sítio inicial. Esses dois últimos são importantes exemplos de localização induzida por meio da não-linearidade

### 4.2.2 Influência da Não-Linearidade no Transporte Eletrônico em Cadeias Unidimensionais

Agora iremos investigar a influência da não-linearidade nas propriedades de transporte em redes cristalinas. O sistema que estudaremos aqui consiste em uma cadeia de  $N$  sítios igualmente separados com um defeito central. Estamos interessados no transporte de uma quase partícula ao longo de uma cadeia unidimensional com um defeito central não-linear, o presente sistema é praticamente idêntico ao estudado na seção 2.4.2 (ver Figura 2.3), a única diferença consiste no fato de que iremos considerar agora a presença de um defeito não-linear. O sistema será modelado pela equação DNLS (Eq. 4.2), por simplicidade vamos considerar  $\gamma = 1.0$  e  $\psi_n(t)$  é a amplitude da função de onda na forma estacionária, com  $\psi_n(t) = \psi_n e^{-iEt}$ . O potencial *on-site* é nulo para todos os sítios, exceto para o sítio  $n = 1$ , onde o potencial *on-site* vale  $V$  e representa o defeito não-linear,  $\alpha$  é o fator que controla a não-linearidade e a relação de dispersão do sistema na região fora do defeito é  $E = -2\cos(k)$ , temos então:

$$\psi_{n-1} = -\psi_{n+1} + (V_n - E + \alpha)|\psi_n|^2\psi_n. \quad (4.3)$$

Quando uma onda plana com número de onda  $k$  é inserida na cadeia pela esquerda, ela será espalhada pela presença do defeito e terá uma parte refletida e outra transmitida, de modo que temos as seguintes condições de contorno:

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 0 \\ T e^{ikn}, & n \geq 1 \end{cases}, \quad (4.4)$$

sendo  $R_0$ ,  $R$  e  $T$  as amplitudes das ondas incidente, refletida e transmitida, respectivamente. Queremos encontrar uma expressão para o coeficiente de transmissão  $t$ , para isso usamos as condições de contorno e obtemos:

$$R_0 = \frac{\psi_0 e^{-ik} - \psi_1}{e^{-ik} - e^{ik}}. \quad (4.5)$$

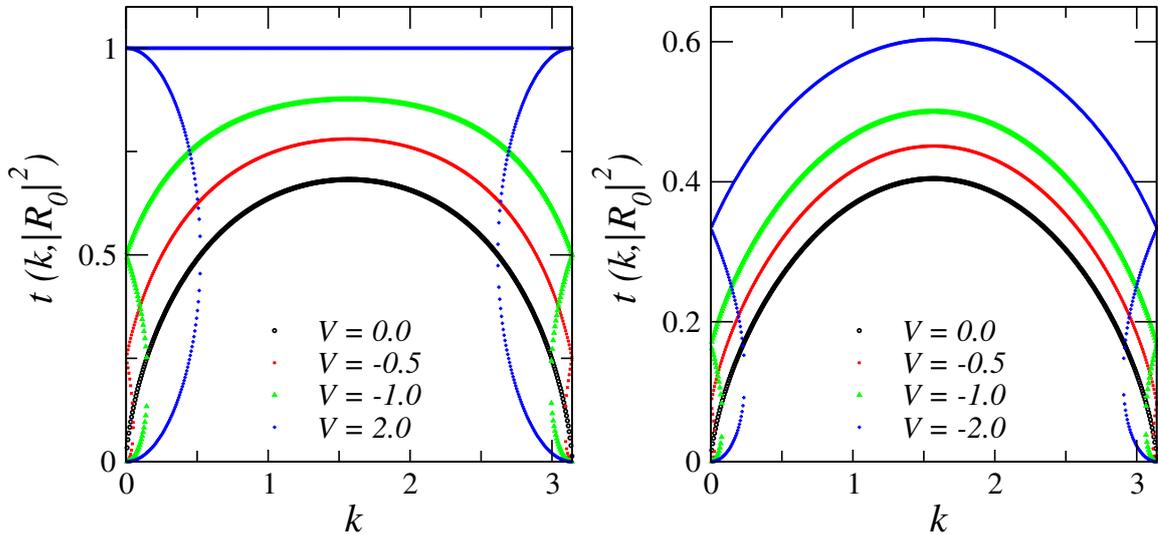
Iremos agora escrever a equação de Schrödinger para o sítio  $n = 0$ :

$$\psi_0 = -\psi_2 + (V - E + \alpha|\psi_1|)\psi_1, \quad (4.6)$$

usando a Eq. 4.5 e o fato de que  $\psi_1 = T e^{ik}$  e  $\psi_2 = T e^{2ik}$ , após uma curta álgebra obtemos:

$$t(k, R_0) \equiv \frac{|T|^2}{|R_0|^2} = \frac{1}{1 + \left( \frac{V + \alpha|T|^2}{2\text{sen}(k)} \right)^2} \quad (4.7)$$

Figura 4.3: Coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  da onda plana incidente para diferentes valores do potencial *on-site*  $V$  e para (a)  $\alpha = 1.0$  esquerdo e (b)  $\alpha = 3.0$ .



Fonte: Autor, 2018.

Note que quando  $V = 0$ , ao contrário do que vimos na seção 2.4.2, a transmissão não é unitária, pois mesmo tendo todos os sítios com a mesma energia *on-site*, ainda temos um defeito devido a presença da não-linearidade. O coeficiente de transmissão obedece a uma equação polinomial de terceiro grau, admitindo então até três soluções reais, observe ainda que quando  $\alpha = 0$  recuperamos a expressão do caso que estudamos na seção 2.4.2.

Para estudarmos com mais detalhes a influência da não-linearidade no sistema mostramos gráfico do coeficiente de transmissão em função do número de onda da onda incidente para valores distintos de  $V$ ,  $|R_0|^2 = 2.0$ , na Figura 4.3a  $\alpha = 1.0$  e na 4.3.b  $\alpha = 3.0$ .

Observe que a presença da não-linearidade induz o surgimento de regiões de multi-estabilidade, ou seja, para um mesmo valor do número de onda  $k$  encontramos diferentes valores para o coeficiente de transmissão, por isso é possível que a onda seja transmitida para  $k = 0$  e  $k = \pi$ , ao contrário do que vimos quando  $\alpha = 0$  (ver Figura 2.4a). Vale salientar ainda que quando a amplitude da onda incidente  $|R_0|^2 = -V/\alpha$  a transmissão é unitária para qualquer valor de  $k$ , ou seja, a não-linearidade cancela o efeito do potencial *on-site* do defeito. Note ainda que, a transmissão diminui quando aumentamos o valor do parâmetro que controla a não-linearidade.

## 5

# TRANSPORTE NÃO-RECÍPROCO EM UMA CADEIA COM DEFEITO NÃO-HERMITIANO E NÃO-LINEAR

A proposição de sistemas, na escala micro e nano, que apresentam a capacidade de transportar informação de modo controlável, mesmo na presença de imperfeições, é de grande importância devido às inúmeras aplicações tecnológicas. Tal fato tem provocado um interesse ainda maior no estudo de fenômenos de transporte e um grande empenho experimental tem sido feito para a construção de dispositivos que sejam capazes de operar de maneira não-recíproca, em diversas áreas como óptica, eletrônica e acústica.

Dentre as diversas maneiras de quebrar a reciprocidade de um sistema, podemos destacar a não-hermiticidade e a combinação da não-linearidade com assimetria espacial, por serem maneiras relativamente simples de obter o efeito diodo. Diante disso, nosso objetivo neste capítulo é estudarmos os efeitos que surgem nas propriedades de transporte, quando unimos não-hermiticidade e não-linearidade.

### 5.1 Desenvolvimento Analítico do Método

Consideraremos aqui o transporte de ondas harmônicas quânticas através de duas cadeias hermitianas do tipo *tight-binding*, que estão conectadas por um único defeito com um acoplamento não-linear e assimétrico fora-diagonal (ver Figura 5.1). O sistema será modelado pela equação linear discreta de Schrödinger para as duas cadeias hermitianas e a

equação discreta de Ablowitz-Ladik (ABLOWITZ e LADIK, 1973) descreverá a evolução temporal da amplitude da onda no defeito. Começamos expandindo o estado  $|\psi_n(t)\rangle$  do sistema na base Wannier  $|n\rangle$ ,  $|\psi_n(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |n\rangle$ , sendo  $|n\rangle$  um estado localizado no sítio  $n$  da cadeia. A evolução da amplitude da onda  $\psi_n(t)$  para as duas cadeias laterais hermitianas do tipo *tight-binding* é regida pela equação linear hermitiana de Schrödinger dependente do tempo:

$$i \frac{d\psi_n(t)}{dt} = V_n \psi_n(t) + \psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t). \quad (5.1)$$

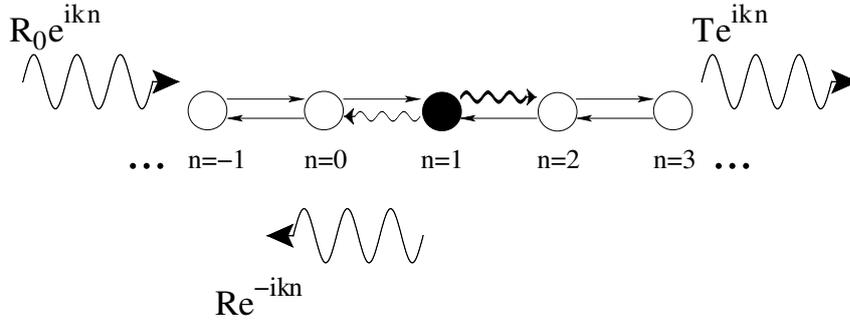
Aqui, as taxas de *hopping* entre os sítios adjacentes foram ajustadas iguais à unidade e  $n \leq 0$  e  $n \geq 2$  representam as cadeias semi-infinitas esquerda e direita. No que se segue, usaremos unidades de  $\hbar = 1$  e a energia potencial *on-site* em todos os sítios das cadeias lineares sendo  $V_n = 0$  como referência, sem perda de generalidade.

A evolução temporal da amplitude da onda no defeito será regida por uma equação não-linear e não-hermitiana de Ablowitz-Ladik (ABLOWITZ e LADIK, 1976), dada por:

$$\begin{aligned} i \frac{d\psi_1(t)}{dt} &= V\psi_1(t) + \psi_0(t) + \psi_2(t) + \\ &+ (1 - \varepsilon) \frac{\alpha}{2} |\psi_1(t)|^2 \psi_0(t) + (1 + \varepsilon) \frac{\alpha}{2} |\psi_1(t)|^2 \psi_2(t). \end{aligned} \quad (5.2)$$

O sítio  $n = 1$  representa o defeito não-linear (ver Figura 5.1) com energia potencial *on-site*  $V_1 = V$ . O parâmetro  $\alpha$  representa a intensidade da resposta não-linear, atuando apenas dentro do defeito central. Observe que a contribuição não-linear está presente somente no *hopping* do sítio do defeito para seus vizinhos. O *hopping* para o sítio do defeito permanece unitário, conforme dado pela Eq. (5.1). Essa assimetria entre as amplitudes do *hopping* do defeito e seus vizinhos dá um caráter não-hermitiano à dinâmica do sistema. A introdução de taxas de *hopping* assimétrico foi originalmente estudada por Hatano e Nelson (NELSON e HATANO, 1996). A implementação experimental de taxas de *hopping* assimétrico já foi feita para alguns sistemas ópticos, como, por exemplo, ressonadores ópticos e microanéis acoplados (LONGHI et al., 2015). A quebra da paridade é controlado pelo parâmetro  $\varepsilon$  que torna a contribuição não-linear não-hermitiana assimétrica entre o sítio do defeito ( $n = 1$ ) e os sítios adjacentes ( $n = 0$  e  $n = 2$ ).

Figura 5.1: Representação esquemática de duas cadeias laterais lineares acopladas por um único sítio defeituoso. Uma onda plana que entra do lado esquerdo é espalhada pelo defeito gerando uma onda refletida e uma transmitida. No presente trabalho, o defeito tem uma não-linearidade não-hermitiana e assimétrica. As setas retas representam uma amplitude de *hopping* unitária. As setas onduladas representam uma contribuição não-linear para o termo de *hopping*, que é mais forte para o lado direito do sítio de defeito.



Fonte: Autor, 2017.

As Eqs. (5.1) e (5.2) têm soluções estacionárias  $\psi_n(t) = \psi_n e^{-iE(k)t}$ , sendo  $-\pi \leq k < \pi$  o número de onda Bloch e  $E(k) = e^{ik} + e^{-ik}$  é a curva de dispersão de energia nas regiões lineares. Quando uma onda plana é inserida pelo lado esquerdo, sofre um espalhamento devido ao defeito. As ondas transmitidas e refletidas emergem após o espalhamento. As soluções das Eqs. (5.1) e (5.2) para uma onda plana proveniente da esquerda, pode ser escrita por:

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 1 \\ T e^{ikn}, & n \geq 1 \end{cases}, \quad (5.3)$$

sendo  $R_0$ ,  $R$  e  $T$  as amplitudes das ondas incidente, refletida e transmitida, respectivamente (veja a Figura 5.1). Para relacionar as amplitudes das ondas incidente e transmitida, nós usamos o método iterativo, que consiste em associar à Equação de Schrödinger um mapa para o potencial tipo delta e partindo do conhecimento da função de onda no sítio  $n + 1$ , obter a função de onda no sítio  $n$  (para mais detalhes ver (SANCHEZ et al., 1994)),] para a equação não-linear Ablowitz-Ladik independente do tempo (5.2), dessa forma podemos expressar a amplitude da onda no sítio  $n = 0$ , como:

$$\psi_0 = \frac{[E(k) - V]\psi_1 - \psi_2 - (1 - \varepsilon)\alpha/2|\psi_1|^2\psi_2}{[1 + (1 - \varepsilon)\alpha/2|\psi_1|^2\psi_0]}. \quad (5.4)$$

A condição de contorno no sítio  $n = 1$  com a cadeia lateral esquerda fornece:

$$R_0 = \frac{\psi_0 e^{ik} - \psi_{-1}}{e^{ik} - e^{-ik}}. \quad (5.5)$$

Após uma álgebra direta, o coeficiente de transmissão pode ser escrito em uma forma transcendental, dada por:

$$\begin{aligned} t(k, |R_0|^2) &= \frac{|T|^2}{|R_0|^2} \\ &= \frac{4 \operatorname{sen}^2 k [1 + (1 - \varepsilon)\alpha/2t|R_0|^2]^2}{4 \operatorname{sen}^2 k + V^2 + \alpha t|R_0|^2 (4 \operatorname{sen}^2 k + 2V \cos k + \alpha t|R_0|^2)}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Uma vez que o sistema é não-hermitiano, o espalhamento causado pelo defeito pode resultar em ganho ou perda. Portanto, devemos também avaliar explicitamente o coeficiente de reflexão  $r \equiv \frac{|R|^2}{|R_0|^2}$  e, em geral,  $t + r \neq 1$ . Para obter o coeficiente de reflexão, podemos seguir etapas semelhantes às descritas acima, resultando em:

$$\begin{aligned} r(k, |R_0|^2) &= \frac{|R|^2}{|R_0|^2} \\ &= \frac{V^2 + \alpha t|R_0|^2 [(t|R_0|^2 \alpha/2)(2V \cos k + (1 - \varepsilon^2) \cos 2k + (1 + \varepsilon^2))]}{4 \operatorname{sen}^2 k [1 + (1 - \varepsilon)\alpha + t|R_0|^2]}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

com  $t$  obtido da Eq.(5.6).

Para o caso de uma onda plana vindo do caminho oposto, inserida pelo lado direito, as equações acima permanecem praticamente as mesmas, apenas mudando o sinal de  $\varepsilon$ . Para caracterizar a possibilidade de assimetria na transmissão, analisaremos também o comportamento do fator de retificação, definido como:

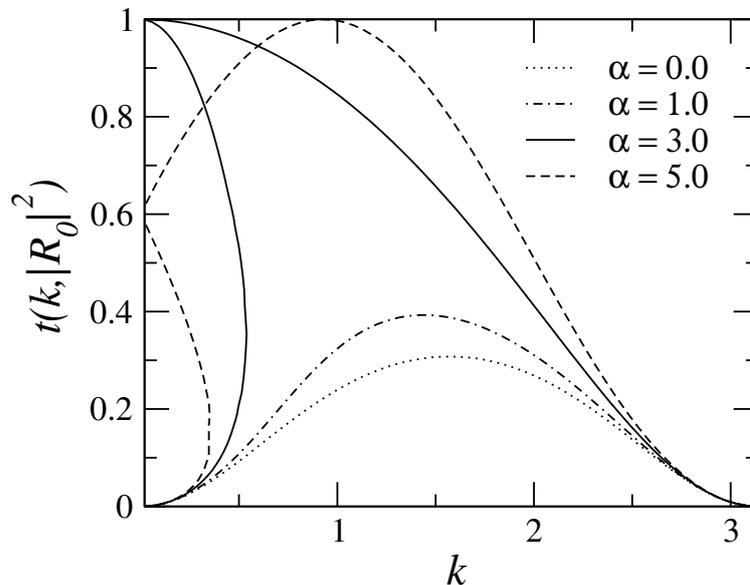
$$f_t(k, |R_0|^2) = \frac{t_L(k, |R_0|^2) - t_R(k, |R_0|^2)}{t_L(k, |R_0|^2) + t_R(k, |R_0|^2)}, \quad (5.8)$$

sendo  $t_L$  ( $r_L$ ) e  $t_R$  ( $r_R$ ) o coeficiente de transmissão (reflexão) das ondas vindo da esquerda e da direita, respectivamente. O fator de retificação para a onda refletida ( $f_r$ ) é definido de

forma semelhante. Devido à contribuição não-linear, regiões de multiestabilidade podem aparecer associadas à soluções distintas para um determinado vetor de ondas  $k$ , conforme demonstraremos a seguir. Neste caso, o fator de retificação é calculado selecionando o modo com maiores coeficientes de transmissão/reflexão na região de multiestabilidade.

Iremos apresentar agora um estudo detalhado do espectro de transmissão e reflexão do modelo de cadeias acopladas por meio de um defeito não-hermitiano e não-linear anteriormente descrita, representadas esquematicamente na Figura 5.1. Em todos os casos que serão mostrados adiante, iremos considerar  $|R_0|^2 = 1.0$  e o potencial *on-site*  $V = -3.0$  para o sítio  $n = 1$ . Os resultados que estamos relatando são qualitativamente similares para outros conjuntos de parâmetros.

Figura 5.2: Espectro do coeficiente de transmissão como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\alpha$ , que controla a não-linearidade, para o caso de um defeito não-linear e não-hermitiano em que a paridade é conservada. As janelas de multiestabilidade surgem regime de  $k$  pequeno e de  $\alpha$  grande.



Fonte: Autor, 2017.

Vamos começar o nosso estudo, plotando o coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$ , para uma onda incidindo pelo lado esquerdo no caso particular de um defeito não-linear onde a paridade é conservada. Para isso, consideramos que as taxas de *hopping* entre o sítio do defeito e seus vizinhos são iguais, ou seja,  $\varepsilon = 0$ . O comportamento do coeficiente de transmissão  $t(k, |R_0|^2)$  do seria o mesmo para uma onda

que vem do lado direito, porque o sistema, neste caso, se torna espacialmente simétrico. Consideramos valores distintos para o parâmetro  $\alpha$  que controla a não-linearidade  $\alpha$ , como ilustrado na Figura 5.2. Quando o parâmetro de não-linearidade  $\alpha$  é aumentado, observa-se o surgimento de uma região de multiestabilidade para valores pequenos do vetor de onda  $k$ . Na região da multiestabilidade, existem três modos de transmissão para cada número de onda de incidente  $k$ . A região de multiestabilidade torna-se mais ampla para valores maiores da não-linearidade. A janela de multiestabilidade começa a surgir para  $\alpha > -V$ . Em  $k = 0$ , os dois modos extras têm o mesmo coeficiente de transmissão  $t(0, |R_0|^2) = -V/\alpha$  para  $\alpha \geq -V$ , como mostrado na Figura 5.2.

## 5.2 Transporte Não-Recíproco

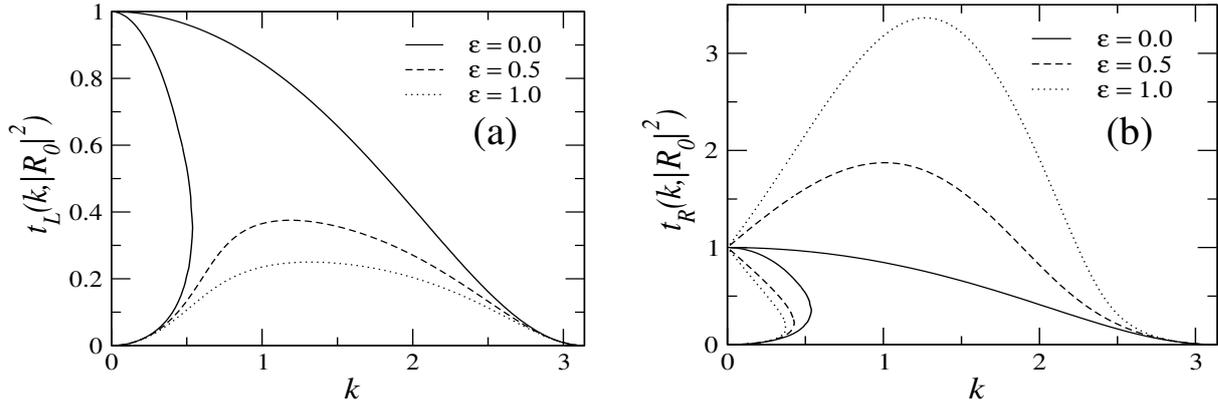
No que se segue, exploraremos a possível ocorrência de transporte assimétrico através de uma rede *tight-binding* unidimensional com um defeito não-linear e não-hermitiano central. Aqui, a ruptura de paridade é introduzida por taxas de *hopping* desiguais entre o defeito e seus sites adjacentes ( $\varepsilon \neq 0$ ).

### 5.2.1 Análise para $\alpha = |V|$

Ao longo desta seção estudaremos as propriedades de transmissão de ondas planas inseridas na cadeia representada na Figura 5.1 para o caso em que  $|V| = \alpha = 3.0$ . Na Figura 5.3, mostramos o coeficiente de transmissão como função do número de onda  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ . Para o caso de uma onda plana proveniente do lado esquerdo, Figura 5.3a, observamos que a transmissão máxima ( $t = 1.0$ ) ocorre em  $\varepsilon = 0$  e  $k = 0$ , ou seja, quando a rede é espacialmente simétrica. Observe que, à medida que o coeficiente  $\varepsilon$  cresce, o coeficiente de transmissão diminui. Na Figura 5.3b mostramos a mesma análise para uma onda plana proveniente do lado direito. Aqui, observamos um comportamento inverso. A transmissão aumenta predominantemente para as assimetrias maiores (valores maiores de  $\varepsilon$ ). Na região de multiestabilidade, este é o comportamento representado pelo modo com transmissão máxima. Observe que o coeficiente de transmissão pode se tornar maior que a unidade para  $\varepsilon > 0$ . Isso está associado a um ganho intrínseco, como será

discutido abaixo.

Figura 5.3: Coeficiente de transmissão em função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . (a) Incidência pelo lado esquerdo; (b) incidência pelo lado direito. Note que a janela de multiestabilidade persiste para o caso de incidência pela direita (b) e desaparece com o aumento da assimetria para uma onda incidindo pelo lado oposto (a). Transmissão não-recíproca é alcançada, especialmente na região de multiestabilidade.



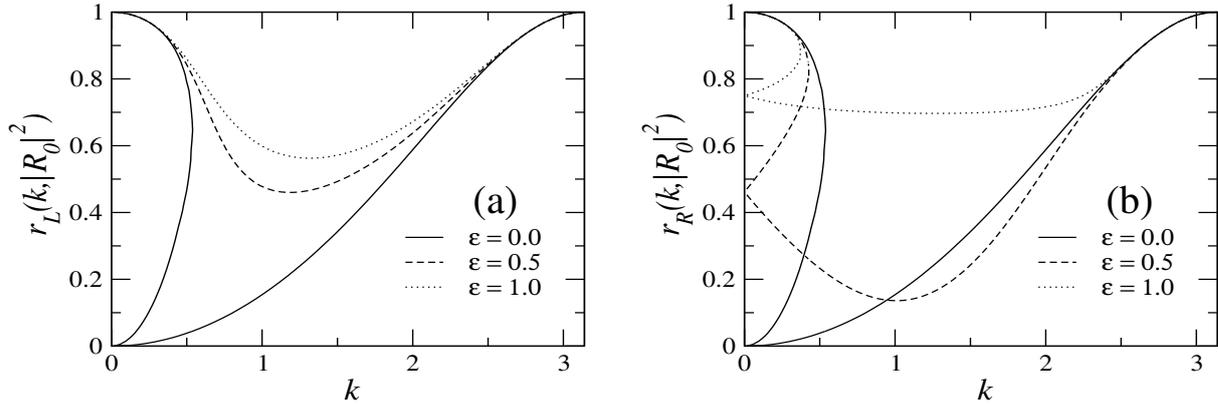
Fonte: Autor, 2017.

Na Figura 5.4a, plotamos o coeficiente de reflexão  $r$  como função do número de onda  $k$  para uma onda incidente vindo do lado esquerdo e com  $\alpha = 3.0$ . Observa-se que o coeficiente de reflexão aumenta e a multiestabilidade é suprimida quando o parâmetro de assimetria  $\varepsilon$  cresce. O coeficiente de reflexão para os modos extras que aparecem na região de multiestabilidade induzida pela não-linearidade subjacente desaparecem no limite  $k \rightarrow 0$ . Esses modos extras têm uma reflexão finita no regime de  $k$ -pequeno e para valores altos da não-linearidade.

Para uma onda inserida pelo lado direito, Figura 5.4b, o coeficiente de reflexão também exibe uma tendência geral de se tornar maior para assimetrias grandes. No entanto, a região de multiestabilidade persiste quando o coeficiente de reflexão dos modos extras se aproximam da unidade e  $\varepsilon$  aumenta. Observe que, contrariamente à possibilidade de ter uma onda transmitida de intensidade maior que a incidente (veja Figura 5.2b onde  $t > 1$ ), a onda refletida é sempre menos intensa que a onda incidente.

A possibilidade de ganho ou perda de energia é uma tendência geral no estudo de propagação de onda não-hermitiana (LONGHI et al., 2015). No modelo atual, de cadeias não-lineares não-hermitianas assimétricas acopladas, podemos caracterizar esse

Figura 5.4: Coeficiente de reflexão como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . (a) Incidência do lado esquerdo; (b) Incidência do lado direito. Os modos extras na janela de multiestabilidade possuem coeficientes de reflexão que se aproximam da unidade para a incidência do lado esquerdo. A reflexão não-recíproca também é alcançada, mas em menor grau do que o exibido pelo componente de onda transmitida (ver Figura 5.3).



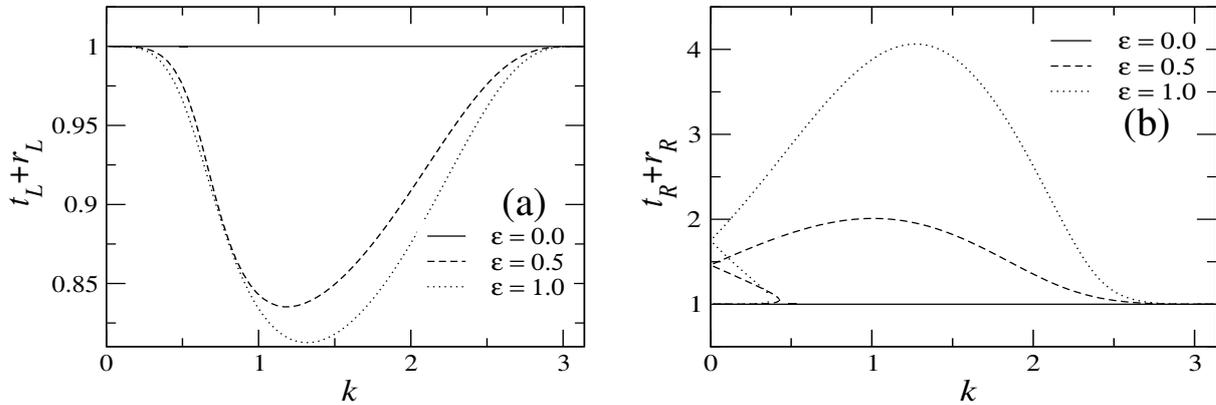
Fonte: Autor, 2017.

aspecto calculando a intensidade relativa total das ondas espalhadas  $t + r$  para valores distintos do parâmetro de assimetria  $\varepsilon$ . Espectros ilustrativos da intensidade relativa total são mostrados na Figura 5.5 para ambos os casos de (a) incidência pela esquerda e (b) incidência através do lado direito. Em geral, a perda de energia ocorre quando a onda refletida no defeito não-hermitiano experimenta uma amplitude de *hopping* menor do que a onda transmitida, como mostrado na Figura 5.5a. No caso de incidência pelo lado oposto com taxas de *hopping* não-hermitianas maiores (Figura 5.5b), desenvolveu-se um ganho significativo.

Mostraremos a seguir a evolução temporal de um pacote de onda Gaussiano incidindo pelo esquerdo e do lado direito do defeito. Para tanto, resolvemos numericamente o conjunto de equações Schrödinger lineares dependentes do tempo, que se descrevem a dinâmica nos sítios lineares, juntamente com a equação não-linear assimétrica de Ablowitz-Ladik que descreve o comportamento no sítio do defeito. Consideramos um pacote de ondas inicial na forma:

$$\Psi_n(0) = Ae^{-(n-n_0)^2/4\sigma^2} e^{ikn}, \quad (5.9)$$

Figura 5.5: Intensidade relativa total da onda espalhada (transmitida e refletida) como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$  e  $\alpha = -V = 3.0$ . (a) Uma onda plana proveniente do lado esquerdo exhibe perda de energia ( $t + r < 1$ ) para acoplamentos não-hermitianos. (b) O ganho de potência ocorre para o caso de incidência do lado direito.

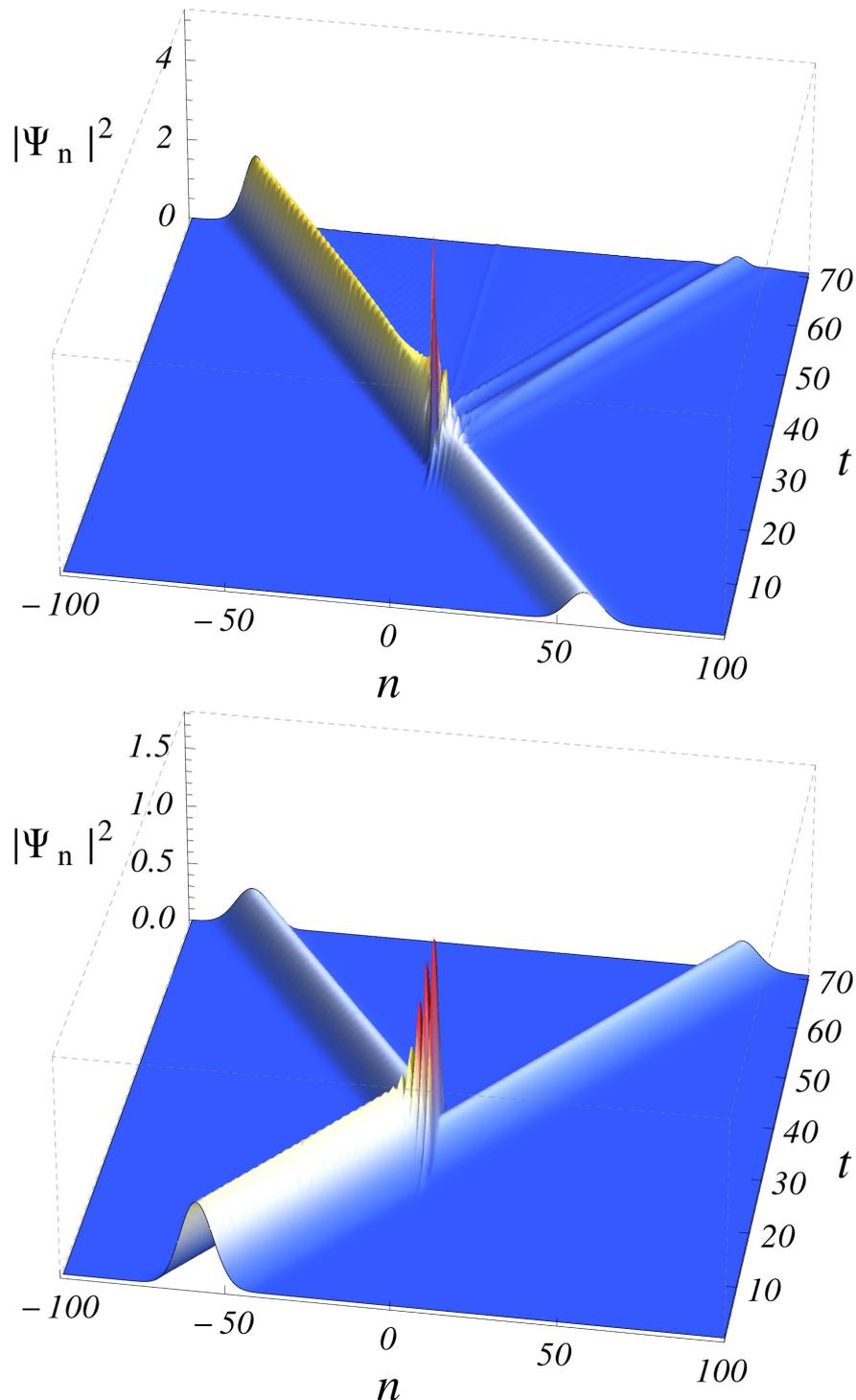


Fonte: Autor, 2017.

sendo  $A$  a amplitude do pacote de onda,  $\sigma$  sua largura,  $n_0$  sua posição inicial central e  $k$  um vetor de onda geral que governa a velocidade do pacote de onda. Na Figura 5.6, ilustramos a dispersão do pacote de ondas pelo defeito usando como um conjunto ilustrativo de parâmetros  $V = -3.0$ ,  $\alpha = 3.0$ ,  $\varepsilon = 0.5$ ,  $A = 0.6$ ,  $\sigma = 5.0$ ,  $n_0 = \pm 60$  e  $k = \pm \pi/2$ . Para o caso da incidência do lado esquerdo (para o qual a onda refletida experimenta uma contribuição não-linear menor o *hopping* que a onda transmitida), a componente transmitida é mais fraca que a refletida, como mostrado na Figura 5.6a. Por outro lado, a onda é predominantemente transmitida para a direção da incidência oposta. Observe que, neste caso, um certo grau de amplificação da onda é alcançado. Esses recursos corroboram a análise espectral anterior. Além disso, uma fração do pacote de ondas fica presa perto do defeito devido à sua natureza fortemente não-linear.

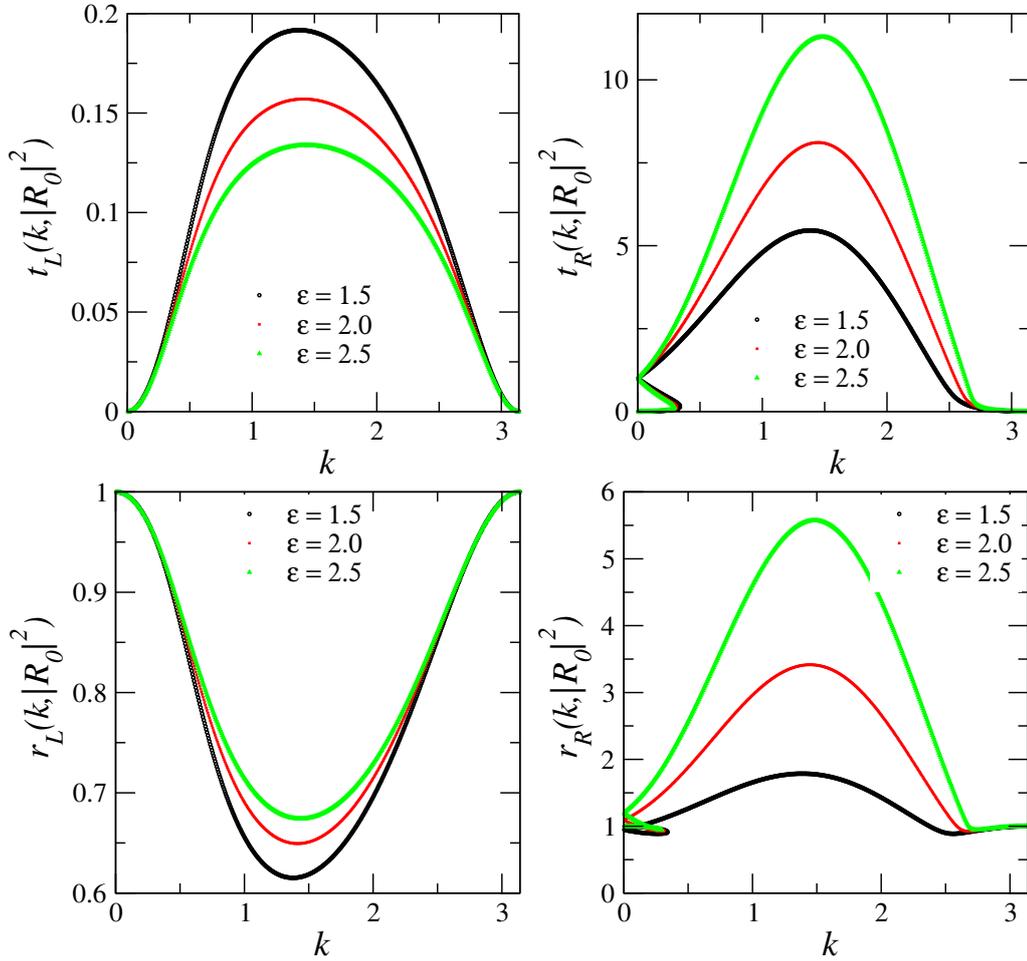
Até então consideramos que  $0 \leq \varepsilon \leq 1$ , antes de terminar estudaremos alguns casos para  $\varepsilon > 1$ . Na Figura 5.9, mostramos os gráficos do coeficiente de transmissão em função do número de onda para diferentes valores do parâmetro  $\varepsilon$  que controla a não-hermiticidade, para uma onda plana incidindo pelo lado (a) esquerdo e (b) direito.

Figura 5.6: Evolução temporal de um pacote de ondas Gaussiano viajando para o sítio do defeito não-linear não-hermitiano localizado em  $n = 1$ . Painel superior: incidência pelo lado esquerdo. Painel inferior: incidência pelo lado direito. Uma transmissão não-recíproca significativa é conseguida com um grau mais alto para a incidência através do lado direito. Os parâmetros são  $V = -3.0$ ,  $\alpha = 3.0$ ,  $\epsilon = 0.5$ ,  $A = 0.6$ ,  $\sigma = 5.0$ ,  $n_0 = \pm 60$  e  $k = \pm\pi/2$ .



Fonte: Autor, 2017.

Figura 5.7: Coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda para uma onda plana incidindo pelo lado (a) esquerdo e (b) direito. Aqui consideramos alguns casos em que  $\varepsilon > 1.0$ . Para a incidência pelo lado direito a reflexão é predominante maior que a unidade.



Fonte: Autor, 2018.

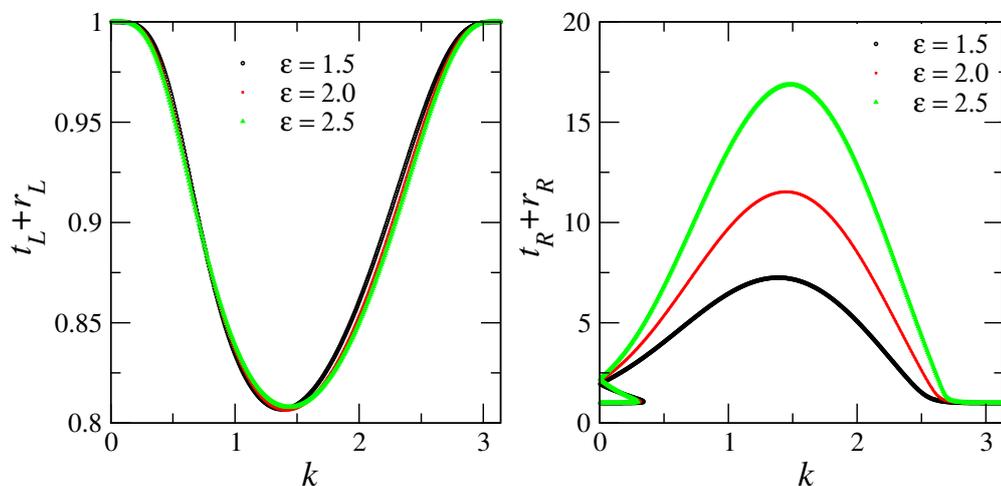
O coeficiente de transmissão para uma onda incidente pelo lado esquerdo possui valores pequeno, já para incidência pela direita os valores são consideravelmente altos, se comparado aos casos que analisamos até então. Note que à medida que  $\varepsilon$  aumenta a transmissão pelo lado direito diminui enquanto pelo lado esquerdo aumenta. A região de multiestabilidade emerge apenas para a transmissão pela direita.

A reflexão para incidência pela esquerda, possui maiores valores que a transmissão, o mesmo não ocorre para a incidência pelo lado oposto, onde o coeficiente de reflexão possui valores menores que a transmissão, como pode ser observado na Figura 5.10. No entanto, vale salientar que para uma onda plana incidindo através do lado direito o coeficiente de

reflexão é predominantemente maior que 1.0, ao contrário do que vimos para  $0 \leq \varepsilon \leq 1$  onde a reflexão era sempre menor que a unidade.

Para um melhor entendimento da capacidade de perda ou ganho do sistema, mostramos na Figura 5.11 os gráficos para a intensidade total da onda espalhada, ou seja, a onda transmitida e a refletida em termos do número de onda da onda incidente para incidência pela (a) esquerda e pela (b) direita. Quando a onda é inserida na cadeia pelo lado esquerdo e é espalhada pelo defeito a onda transmitida experimenta uma taxa de hopping menor que a onda refletida, para incidência pela direita ocorre o contrário, como resultado temos perda no sistema para o primeiro, e ganho considerável para o segundo. Um fato interessante que vale a pena ser mencionado é que para a incidência pela esquerda as intensidades das ondas espalhadas são praticamente iguais para diferentes valores da assimetria ( $\varepsilon$ ).

Figura 5.8: Intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito.

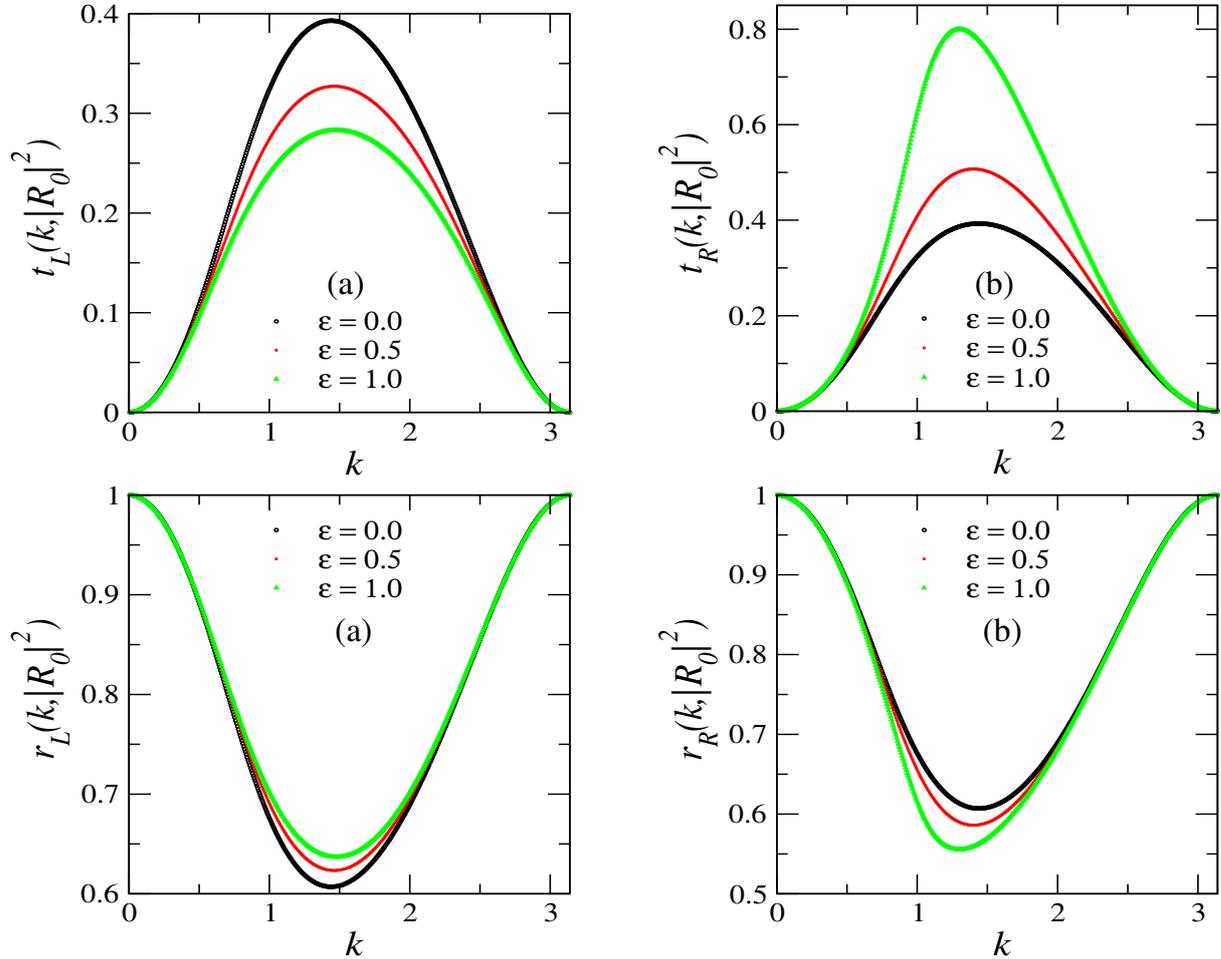


Fonte: Autor, 2018.

### 5.2.2 Análise para $\alpha < |V|$

Nesta seção iremos estudar as propriedades de transmissão do sistema na presença de uma não-linearidade fraca. Em todas as análises apresentadas a seguir consideramos  $V = -3.0$  e  $\alpha = 1.0$ . Na Figura 5.10 mostramos os gráficos para os coeficientes de transmissão e reflexão em função de  $k$  para incidência pela esquerda (a) e pela direita

Figura 5.9: Gráfico do coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  da onda incidente quando a não-linearidade do sistema é fraca ( $\alpha = 1.0$ ), para diferentes valores da assimetria ( $\varepsilon$ ) e para uma onda introduzida na cadeia pelo lado esquerdo (a) e pelo lado direito (b).

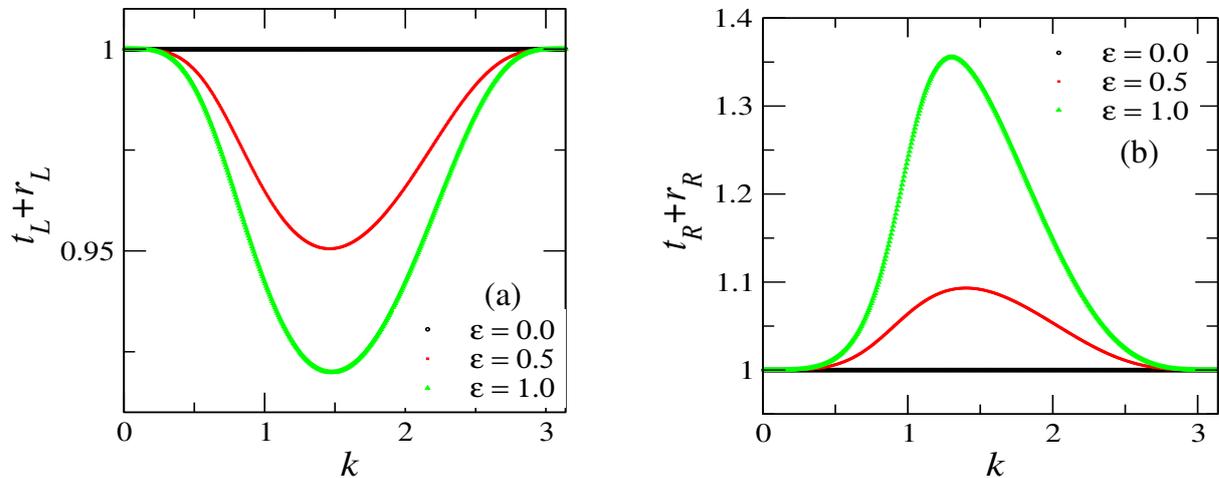


Fonte: Autor, 2018.

(b), verificamos que as regiões de multiestabilidade não aparecem em nenhum dos casos e apesar da presença da assimetria combinada com a não-linearidade a transmissão não alcança altos valores, sendo maior quando uma onda é inserida pelo lado direito. Para incidência pela esquerda  $t$  diminui à medida que  $\varepsilon$  aumenta, já para o lado oposto a transmissão diminui com o aumento da assimetria ( $\varepsilon$ ). Já para a reflexão vemos que o comportamento é praticamente o mesmo para ambos os lados de incidência.

Na Figura 5.11 mostramos o gráfico da intensidade das ondas espalhadas. Notamos que, assim como os casos analisados até aqui, há perda no sistema quando a onda incide através do lado esquerdo e ganho no lado oposto. Quando a assimetria aumenta o

Figura 5.10: Intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito e para  $\alpha = 1.0$ .



Fonte: Autor, 2018.

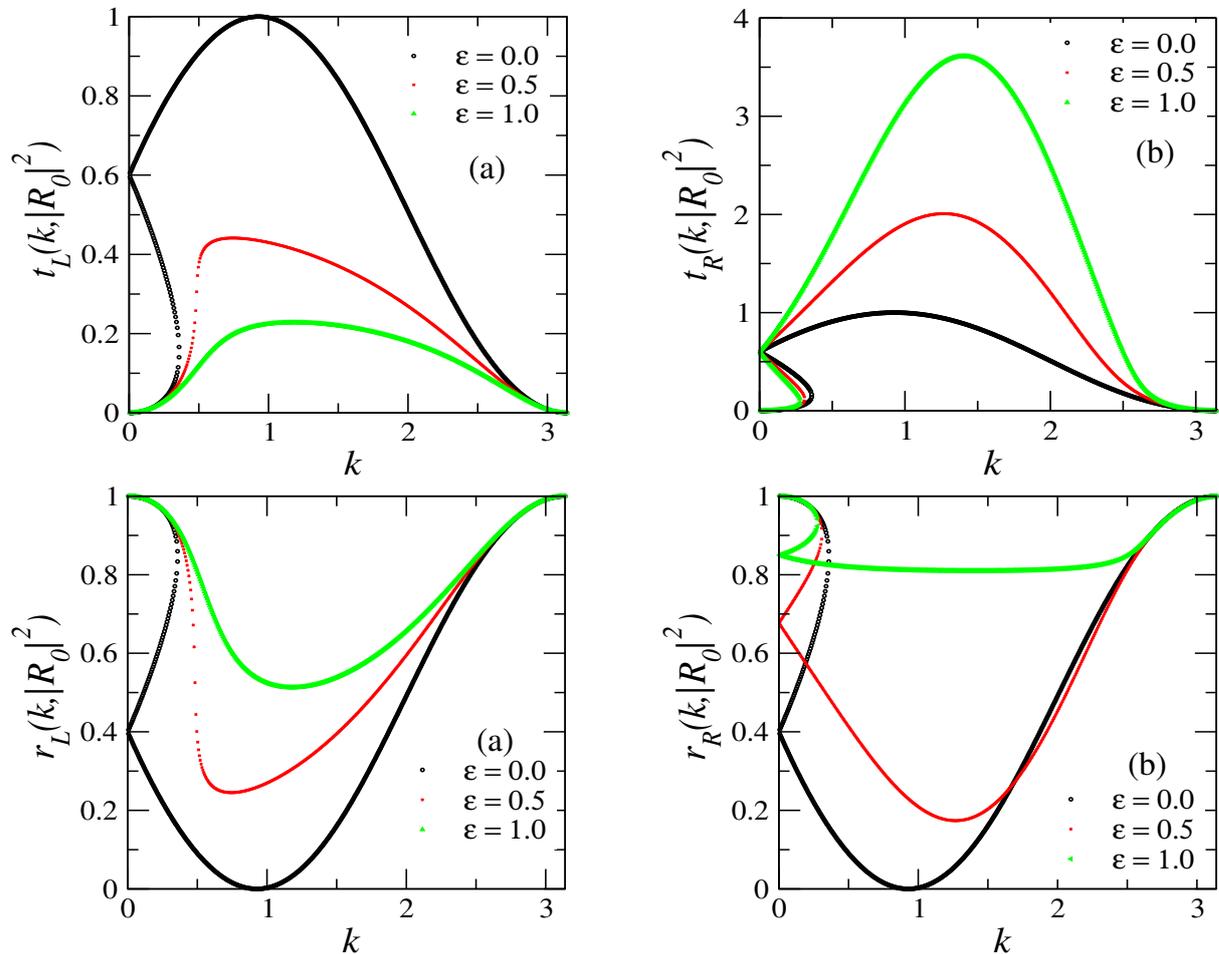
comportamento é intensificado, ou seja, aumenta a perda de uma lado e diminui do outro.

### 5.2.3 Análise para $\alpha > |V|$

Quando a não-linearidade é forte,  $\alpha = 5.0$ , notamos que a região de multiestabilidade surge para ambos os lados de incidência, sendo mais pronunciada para uma onda que se propaga da direita para a esquerda. Para uma onda vindo do lado esquerdo, o maior valor para a transmissão é obtido quando o sistema é simétrico ( $\varepsilon = 0$ ) e diminui conforme  $\varepsilon$  aumenta, nessa situação a região de multiestabilidade desaparece. Para o lado oposto, a região de multiestabilidade surge para todos os valores de  $\varepsilon$  analisados e ao contrário do que vimos para o caso anterior, aqui a transmissão aumenta à medida que aumentamos a assimetria. Mostramos ainda o gráfico do coeficiente de reflexão  $r$  em função do número de onda  $k$ , a reflexão é sempre menor que a incidência e diminui com o aumento da assimetria ocasionando a supressão da região de multiestabilidade para uma onda plana inserida na cadeia através do lado esquerdo.

Na Figura 5.13 é mostrado o gráfico da intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito e para  $\alpha = 5.0$ . O sistema apresenta perda para incidência pela

Figura 5.11: Gráfico do coeficiente de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  da onda incidente quando a não-linearidade do sistema é forte ( $\alpha = 5.0$ ), para diferentes valores da assimetria ( $\varepsilon$ ) e para uma onda introduzida na cadeia pelo lado esquerdo (a) e pelo lado direito (b).



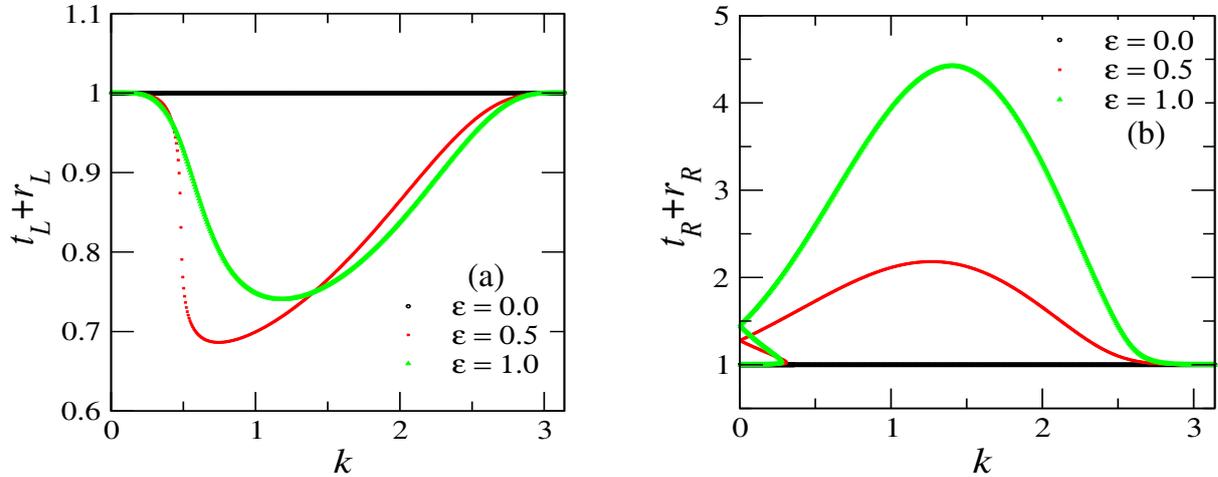
Fonte: Autor, 2018.

esquerda e ganho para o lado oposto e o aumento da assimetria realça esse comportamento.

#### 5.2.4 Estudo das Propriedades de Transmissão via Fator de Retificação

Os espectros distintos de transmissão para ondas provenientes de diferentes lados do defeito não-linear e não-hermitiano mostraram a possibilidade de uma operação eficiente do tipo diodo, que consiste numa transmissão de onda em uma direção sendo muito mais pronunciada do que na outra. Para explorar esse aspecto, plotamos na Figura 5.13 os espectros do fator de retificação para a onda transmitida para dois valores representativos

Figura 5.12: Intensidade total da onda espalhada em função de  $k$  para valores distintos de  $\varepsilon$ , para uma onda plana incidindo através do lado (a) esquerdo e (b) direito e para  $\alpha = 5.0$ .

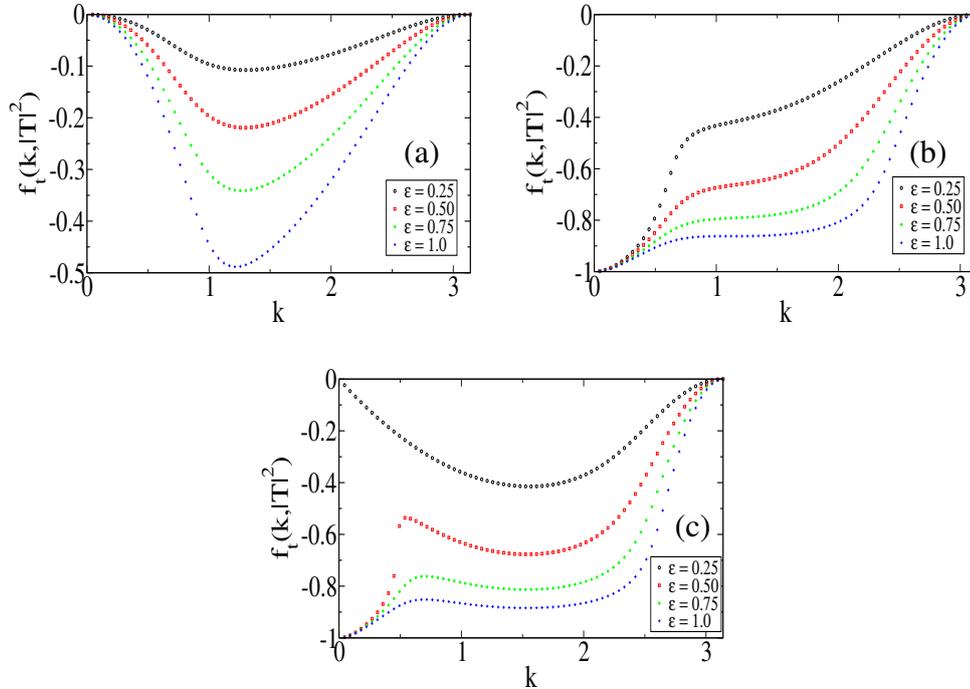


Fonte: Autor, 2018.

do coeficiente  $\alpha$  associado a não-linearidade. Para valores pequenos da não-linearidade (Figura 5.13a), a retificação não é muito eficiente, embora cresça quando assimetrias maiores são consideradas. A origem física deste comportamento está relacionada ao fato de que não há multiestabilidade quando o sistema é fracamente assimétrico. Uma forte assimetria seria necessária para induzir o surgimento da multiestabilidade para o caso de incidência pelo lado direito, para então desenvolver um efeito de retificação eficiente. Um novo cenário surge para o caso de fortes não-linearidades, como ilustrado na Figura 5.13b. A retificação também é pequena em assimetrias fracas. No entanto, isso se deve a um mecanismo subjacente distinto. Neste caso, a multiestabilidade está presente tanto para as incidências pelo lado esquerdo como pelo lado direito. Aumentar a assimetria leva a uma multiestabilidade pronunciada para a incidência do lado direito, enquanto a multiestabilidade desaparece para a incidência pelo lado oposto.

Como resultado, desenvolve-se uma retificação pronunciada, especialmente no regime de pequenos números de onda. Vale ressaltar que, uma retificação eficiente é alcançada em uma ampla região espectral para assimetrias fortes. Este recurso indica que um comportamento tipo diodo também pode ser reproduzido pelo sistema em estudo para a pacotes de ondas compostos por uma grande faixa de componentes harmônicas. Somente

Figura 5.13: Fator de retificação para transmissão  $f_t$  como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . Diferentes valores do parâmetro  $\alpha$  que controla a não-linearidade foram considerados [(a)  $\alpha = 1.0$ , (b)  $\alpha = 3.0$  e (c)  $\alpha = 5.0$ ]. A retificação eficiente é alcançada no regime de grande não-linearidade e assimetria.

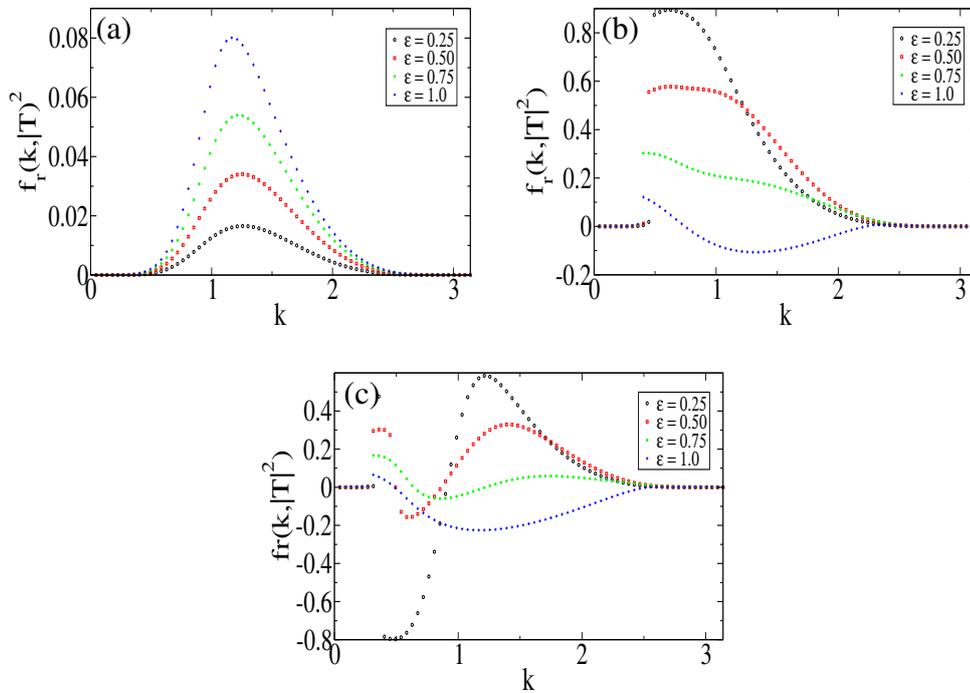


Fonte: Autor, 2017.

componentes harmônicas com comprimentos de onda muito curtos não são retificados de maneira eficiente.

Também mostraremos uma análise similar da eficiência de retificação para o componente de onda refletida. No caso de não-linearidade fraca (Figura 5.14a), a retificação da onda refletida é muito ineficiente porque o coeficiente de reflexão é grande em assimetrias fracas para ambas as direções de incidência. O desenvolvimento de multiestabilidade não promove um aumento substancial de  $f_r$  porque os novos modos extras têm baixos coeficientes de reflexão. Espectros de retificação mais complexos para a componente refletida da onda aparecem em não-linearidades fortes, onde a multiestabilidade está presente para ambas as direções de incidência no regime de  $k$ -pequeno. No entanto, a eficiência de retificação permanece predominantemente baixa, exceto em regiões espectrais estreitas que delimitam a região em que a multiestabilidade permanece apenas para o caso da incidência do lado direito. Observe que  $f_r$  muda de sinal indicando que a retificação ocorre para

Figura 5.14: Fator de retificação  $f_r$  para o coeficiente de reflexão como função do número de onda  $k$  para valores distintos do parâmetro  $\varepsilon$ . Valores distintos do parâmetro de não-linearidade  $\alpha$  foram considerados [(a)  $\alpha = 1.0$ ; (b)  $\alpha = 3.0$  e (c)  $\alpha = 5.0$ ]. A retificação relativamente eficiente é restrita a regiões estreitas espectrais no regime de defeito fortemente não-linear, mas não assimétrico e não-hermitiano.



Fonte: Autor, 2017.

ambos os lados de incidência.

## 6

# CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O objetivo principal do presente trabalho foi estudar as propriedades de transmissão não-recíproca de ondas propagantes ao longo de duas cadeias do tipo *tight-binding* que são conectadas por um único defeito que possui acoplamento não-linear e não-hermitiano fora da diagonal.

No capítulo 2, realizamos uma revisão teórica do estudo das propriedades de transporte em sólidos cristalinos. Calculamos também o coeficiente de transmissão para alguns tipos de cadeias unidimensionais discretas com defeitos distintos, com o intuito de mostrar de maneira simples a aplicação do método utilizado ao longo do desenvolvimento do trabalho. Já no capítulo 3, apresentamos uma revisão bibliográfica dos primeiros trabalhos no âmbito de mecânica quântica não-hermitiana, apresentamos formulação da mecânica quântica não-hermitiana  $\mathcal{PT}$ -simétrica desenvolvida por Bender e Boetcher, e por fim mostramos algumas aplicações de hamiltonianos não-hermitianos em trabalhos que estudam fenômenos de transporte. No capítulo 4, realizamos um estudo sobre não-linearidade e seu impacto nos fenômenos de transporte.

No capítulo 5 unimos o fenômeno da não-hermiticidade e da não-linearidade a fim de investigar a possibilidade de obtenção de transporte robusto unidirecional. Para isso, determinamos de forma analítica a solução de estado estacionário para as ondas planas inseridas em uma cadeia tipo *tight-binding* com um defeito não-linear e não-hermitiano. O defeito foi modelado pela equação de Ablowitz-Ladik com um termo de hopping não-linear conectando-o às cadeias laterais lineares e hermitianas. A não-hermiticidade foi introduzida ao considerar a contribuição não-linear presente na amplitude do hopping entre o

---

sítio do defeito e seus sítios vizinhos. A quebra da paridade devido a tal contribuição não-linear do hopping também foi considerada para investigar o surgimento do transporte não-recíproco. Utilizamos o método iterativo para calcular analiticamente os espectros de transmissão e reflexão para as ondas planas com número de onda  $k$ . Ambos os casos de incidências, lado esquerdo e direito, foram considerados. Em particular, exploramos a possibilidade de conseguir uma operação semelhante a um diodo devido ao efeito combinado da não-hermiticidade e da não-linearidade. A não-hermiticidade gera ganho e perda de energia, bem como algum grau de transmissão assimétrica. Esse comportamento é fortemente aprimorado quando a não-linearidade promove o surgimento de multiestabilidade. Analisamos os espectros dos fatores de retificação tanto para as componentes da onda transmitida quanto refletida. Uma retificação eficiente da componente transmitida foi alcançada no regime de um defeito não-hermitiano e não-linear fortemente assimétrico, exceto para ondas com comprimentos de onda muito curtos. Também mostramos que os pacotes de ondas gaussianos também são retificados de maneira eficiente. Por outro lado, o fator de retificação para a componente refletida exibe uma forma complexa com uma eficiência significativa limitada a regiões espectrais estreitas.

Esperamos que os principais aspectos dos resultados reportados aqui sejam válidos para as propriedades de transporte associadas a fenômenos ondulatórios gerais, como: excitações acústicas, magnéticas, ópticas e elétricas. Nesse sentido, cadeias não-lineares não-hermitianas aparecem como candidatas interessantes para compor uma nova classe de dispositivos com potenciais aplicações tecnológicas. Dentre as possíveis extensões do presente trabalho, podemos citar o estudo das propriedades de transmissão de estruturas com outros tipos de defeitos não-hermitianos (como o potencial *on-site* complexo), cadeias não-hermitianas com desordem e cadeias bidimensional acopladas por defeitos não-hermitianos e não-lineares. Esperamos que futuros estudos ao longo desta direção possam contribuir para difundir e consolidar o formalismo não-hermitiano da mecânica quântica.

# Referências Bibliográficas

- [1] ABLOWITZ, M. J. e LADIK, J. F. **A Nonlinear Difference Scheme and Inverse Scattering**. Stud. Appl. Math., v. 55, p. 213, 1976.
- [2] ABLOWITZ, M. J. e CLARKSON, P.A. **Solitons, Nonlinear Evolution Equations and Inverse Scattering**. London Math. Soc.149, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [3] ASHCROFT, N.W e MERMIN, N.D. **Solid State Physics**. Philadelphia. Saunders, 1976.
- [4] ASSUNÇÃO, T. F. et. al. **Nonreciprocal transmission through a saturable nonlinear asymmetric dimer**. Phys. Rev. E, v. 90, p. 022901, 2014.
- [5] ASSUNÇÃO, T. F. et al. **Phase-shift-controlled logic gates in Y-shaped nonlinearly coupled chains**. Phys. Rev. E, v. 93, p. 022218, 2016.
- [6] BARATA, J. C. A. **Notas para um Curso de Física-Matemática**. Disponível em: < [http : //denebola.if.usp.br/ jbarata/Notas\\_da\\_aula/capitulos.html](http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_da_aula/capitulos.html) >. Acesso em: 2018.
- [7] BENDER, C. M. **Making Sense of Non-Hermitian Hamiltonians**. Rep. Prog. Phys., v. 70, p. 947, 2007.
- [8] BENDER, C. M. e BOETTCHER, S. **Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT-Symmetry**. Phys. Rev. Lett., v. 80, p. 5243, 1998.
- [9] BOEHLER, N. et al. **Bifurcation-based acoustic switching and rectification**. Nature materials, Nature Publishing Group, v. 10, n. 9, p. 665-668, 2011.

- [11] BROUWER, P. W. et al. **Theory of directed localization in one dimension.** Phys. Rev. B, v. 45, p. 8, 1997.
- [11] BROUWER, P. W. et al. **Theory of directed localization in one dimension.** Phys. Rev. B, v. 45, p. 8, 1997.
- [12] CHANG, G. et al. **Solid-state thermal rectifier.** Science , American Association for the Advancement of Science, v. 314, n. 5802, p. 1121-1162, 2006.
- [13] EICHELKRAUT, T. et al. **Mobility transition from ballistic to diffusive transport in non-Hermitian lattices.** Nat. Commun, v. 4, p. 2533, 2013.
- [14] FEISE, M. W. et al. **Bistable diode action in left-handed periodic structures.** Phys. Rev. E, v. 71, p. 037602, 2005.
- [15] GOLDSHEID, I. Ya. e KHORUZHENKO, B. A. **Distribution of eigenvalues in non-Hermitian Anderson models.** Phys. Rev. Lett. 80, p. 2897 - 2900, 1998.
- [16] HASAN, M. Z. e LANE, C. L. **Colloquium: Topological insulators.** Rev. Mod. Phys. v. 82, p. 3045, 2010.
- [17] HAYDOCK, R. e KELLY, M. J. **Solid State Physics.** J. Phys. C: Solid State Phys., v. 8, p.197, 1975.
- [18] HATANO, N. e NELSON, D. R. **Localization Transitions in Non-Hermitian Quantum Mechanics.** Phys. Rev. Lett. v. 77, p. 570, 1996.
- [19] HAYASHI, K e SASA, S. **The Law of Action and Reaction for Effective Force in a Non-equilibrium Colloidal System.** J. Phys. Condens. Matte, v. 18, p. 2825, 2006.
- [20] HELBING, D e MOLNAR, P. **Social Force Model for Pedestrian Dynamics.** Phys. Rev. E 51, 4282, 1995.
- [21] JAMSHIDI-GHALEH, K. et al. **Angular and polarization dependence of all optical diode in one-dimensional photonic crystal.** The European Physical Journal D, Springer, v. 69, n. 4, p. 1-5, 2015.

- [22] JOANNOPOULOS, J. D. et al. **Photonic crystal: Putting a new twist on light.** Nature, v. 386, p. 143, 1997.
- [23] KITTEL, C. **Introduction to solid state physics.** 7<sup>a</sup>ed. New York. John Wiley, 1996.
- [24] KHAWAJA, B. A. e CRYAN, M. J. **Millimeter-wave photonic active integrated antennas using hybrid mode-locked lasers** Microwave and Optical Technology Letters, v. 54, p. 1200, 2012.
- [25] KONIG, M. et al. **Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells.** Science, v. 318, p. 766, 2007.
- [26] KWAN, K. C. et al. **Effects due to disorder on photonic crystal-based waveguides.** Appl. Phys. Lett., v. 82, p. 4414, 2003.
- [27] LEPRI, S. e CASATI, G. **Asymmetric Wave Propagation in Nonlinear Systems.** Phys. Rev. Lett., v. 106, p. 164101, 2011.
- [28] LI, Y. et al. **Wave-packet rectification in nonlinear electronic systems: A tunable Aharonov-Bohm diode.** Scientific Reports, v. 4, p. 4566, 2014.
- [29] LIANG, B. et al., **An acoustic rectifier.** Nature materials, Nature Publishing Group, v. 9, n.12, p. 989-992, 2010.
- [30] LIRA, H. et al. **Electrically driven nonreciprocity induced by interband photonic transition on a silicon chip** Physical review letters, APS, v. 109, n. 3, p. 033901, 2012.
- [31] LONGHI, S. et al. **Making Sense of Non-Hermitian Hamiltonians.** Scientific Reports, v. 5, p. 13376, 2015.
- [32] LONGHI, S. et al. **Non-Hermitian transparency and one-way transport in low-dimensional lattices by an imaginary gauge field.** Phys. Rev. B, v. 92, p. 094204, 2015.

- [33] LONGHI, S. **Tight-binding lattices with an oscillating imaginary gauge field.** Phys. Rev. A, v. 94, p. 022102, 2016.
- [34] MAZNEV, A. et al. **Reciprocity in reflection and transmission: What is a 'phonon diode'?** Wave Motion. Elsevier, v. 50, n. 4, p. 776-784, 2013.
- [35] MELLO, P. A.; TOMSOVIC, S. **Scattering approach to quantum electronic transport.** Phys. Rev. B, v. 46, p. 15 963, 1992.
- [36] MISCHENKO, A. S. e NAGAOSA, N. **Electron-Phonon Coupling and a Polaron in the t-J Model: From the Weak to the Strong Coupling Regime.** Phys. Rev. Lett., v. 93, p. 036402, 2004.
- [37] MOISEYEV, N. **Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling.** Phys. Rep., v. 302, p. 212, 1998.
- [38] MOISEYEV, N. **Non-Hermitian Quantum Mechanics.** Cambridge University: Cambridge, UK, 2011.
- [39] MOURA, F. A. B. F. et al. **Wave-packet dynamics in chains with delayed electronic nonlinear response.** Phys. Rev. Lett., v. 103, p. 096401, 2009.
- [40] MUGA, J.G. et al. **Complex absorbing potentials.** Phys. Rep., v. 395, p. 357, 2004.
- [41] NASCIMENTO, E. M. **Aspectos da transmissão eletromagnética em filmes de multicamadas.** Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2009.
- [42] NOVOSELOV, K. S. et al. **Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene.** Science, v. 315, p. 1379, 2007.
- [43] PELINOSKY, D. E. et al. **PT-symmetric lattices with spatially extended gain/loss are generically unstable.** Europhys. Lett., v. 101, p. 11002, 2013.
- [44] PRANGE, R. E. et al. **The Quantum Hall Effect.** Springer: Berlin, 1986.

- [45] QI, X. L. e ZHANG, S. C. **Topological insulators and superconductors**. Rev. Mod. Phys., v. 83, p. 1057, 2011.
- [46] ROTTER, I. **A non-Hermitian Hamilton operator and the physics of open quantum systems**. J. Phys. A Math. Theor., v. 42, p. 153001, 2009.
- [47] SCHWARTZ, M. D. **Quantum Field Theory and the Standard Model**. Model, Cambridge, 2014.
- [48] SKLAN, S. R. **Splash, pop, sizzle: Information processing with phononic computing** . AIP Advances, v. 5, p. 053302, 2015.
- [49] TANNOUDJI, C. C. et al. **Quantum Mechanics**. Nova York, 1977.
- [50] TOCCI, M. D. et al. **Thin-film nonlinear optical diode**. Appl. Phys. Lett. v. 66, p. 2324, 1995.
- [51] TSUI, D. C. et al. **Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit** . Phys. Rev. Lett. v. 48, p. 1559, 1982.
- [52] WANG, H. et al. **All-optical AND, XOR, and NOT logic gates based on Y-branch photonic crystal waveguide**. Opt. Eng., v. 54, p. 077101, 2015.
- [53] WANG, Y et al. **Phonon lateral confinement enables thermal rectification in asymmetric single-material nanostructures**. Nano letters, ACS Publications, v. 14, n. 2, p. 592-596, 2014.
- [54] WONG, J. **Results on Certain Non-Hermitian Hamiltonians**. J. Math. Phys., v. 8, p. 10, 1967.
- [55] WU, T. T. **Ground State of a Bose System of Hard Spheres**. Phys. Rev., v. 115, p. 1390, 1959.
- [56] WU, T. T. e BENDER, C. **Anharmonic Oscillator**. Phys. Rev., v. 184, p. 1231, 1969.

- 
- [57] YURKEVICH, I. V. e LERNER, I. V. **Delocalization in an Open One-Dimensional Chain in an Imaginary Vector Potential**. Phys. Rev. Lett. 82, 5080,1999.
- [58] ZHAO, H. et al. **Metawaveguide for asymmetric interferometric light-light switching**. Phys. Rev. Lett. v. 117, p. 193901, 2016.
- [59] ZNOJIL, M. **Tridiagonal PT -symmetric N-by-N Hamiltonians and a fine-tuning of their observability domains in the strongly non-Hermitian regime**. J. Phys. A, v. 40, p. 13131, 2007.

## 7

## APÊNDICE

## A. Prova do Teorema de Bloch

Para provar o teorema de Bloch iremos definir um operador de translação  $T_R$  que, para cada vetor  $\vec{R}$  da rede de Bravais, de modo que ao operar em qualquer função  $f(\vec{r})$ , altera o argumento por  $\vec{R}$ , ou seja:

$$T_R f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}). \quad (7.1)$$

Aplicando  $T_R$  em  $H(\vec{r})\psi(\vec{r})$ , temos:

$$T_R H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = H(\vec{r} + \vec{R})\psi(\vec{r} + \vec{R}). \quad (7.2)$$

Levando em consideração o fato que  $H(\vec{r})$  é periódica e usando a Eq. (7.1), podemos escrever

$$T_R H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = H(\vec{r})T_R \psi(\vec{r}). \quad (7.3)$$

Portanto,

$$T_R H(\vec{r}) = H(\vec{r})T_R. \quad (7.4)$$

Aplicações sucessivas de  $T_R$  em  $\psi(\vec{r})$  levam a:

$$\begin{aligned} T_{R'} T_R \psi(\vec{r}) &= T_{R'} \psi(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= \psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}'). \end{aligned} \quad (7.5)$$

Trocando a ordem dos operadores, obtemos a mesma expressão acima. Logo, podemos escrever:

$$T_R T_{R'} = T_{R'} T_R = T_{R+R'}. \quad (7.6)$$

Como visto na Eq. (7.4),  $T_R$  e  $H(\vec{r})$  são operadores que comutam. Da mecânica quântica sabemos que quando dois operadores comutam há uma base na qual os autoestados dos operadores são simultâneos. Levando esse fato em consideração e escrevendo as equações de autovalores para  $T_R$  e  $H(\vec{r})$ , temos:

$$H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (7.7)$$

$$T_R\psi(\vec{r}) = c(\vec{R})\psi(\vec{r}). \quad (7.8)$$

Os autovalores  $c(\vec{R})$  dos operadores de translação estão relacionados pela Eq. (7.6):

$$T_{R'}T_R\psi(\vec{r}) = c(\vec{R})T_{R'}\psi(\vec{r}) = c(\vec{R})c(\vec{R}')\psi(\vec{r}), \quad (7.9)$$

por outro lado:

$$T_{R'}T_R\psi(\vec{r}) = T_{R+R'}\psi(\vec{r}) = c(\vec{R} + \vec{R}')\psi(\vec{r}). \quad (7.10)$$

Dessa forma, os autovalores devem obedecer a relação:

$$c(\vec{R} + \vec{R}') = c(\vec{R})c(\vec{R}'). \quad (7.11)$$

Sejam  $\vec{a}_i$  os três vetores primitivos para a rede de Bravais. Podemos escrever  $c(\vec{a}_i)$  como:

$$c(\vec{a}_i) = e^{2\pi i x_i}. \quad (7.12)$$

Veremos a seguir que para condições de contorno adequadas,  $x_i$  deve ser real, mas, por ora, eles podem ser considerados números complexos gerais.

Sendo  $\vec{R}$  um vetor geral da rede de Bravais dado por:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (7.13)$$

e aplicando o operador de translação sucessivas vezes, podemos escrever:

$$\begin{aligned} c(\vec{R}) &= c(\vec{a}_1)^{n_1}c(\vec{a}_2)^{n_2}c(\vec{a}_3)^{n_3} \\ &= e^{(2\pi i x_1)n_1}e^{(2\pi i x_2)n_2}e^{(2\pi i x_3)n_3} \\ &= e^{[2\pi i(x_1n_1 + x_2n_2 + x_3n_3)]}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Sabendo que:

$$2\pi i(x_1 n_1 + x_2 n_2 + x_3 n_3) = \vec{k} \cdot \vec{R}, \quad (7.15)$$

sendo  $\vec{k} = x_1 \vec{b}_1 + x_2 \vec{b}_2 + x_3 \vec{b}_3$  e  $\vec{b}_i$  os vetores da rede recíproca que satisfazem  $b_i a_j = 2\pi \delta_{ij}$ .

Portanto,  $c(\vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ . Em resumo, mostramos que podemos escolher os autoestados de  $H(\vec{r})$ , de tal forma, que, para cada vetor  $\vec{R}$  da rede de Bravais, temos:

$$\begin{aligned} T_R \psi(\vec{r}) &= \psi(\vec{r} + \vec{R}) = c(\vec{R}) \psi(\vec{r}) \\ \psi(\vec{r} + \vec{R}) &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r}), \end{aligned} \quad (7.16)$$

que é exatamente o teorema de Bloch, dado na Eq.(2.5).

## B. Os Postulados da Mecânica Quântica

Mostraremos aqui alguns axiomas fundamentais da mecânica quântica (COHEN et al., 1977), que formam a sua base e caracterizam a teoria:

- Descrição do Estado de um Sistema Físico (Axioma 1)

Em um dado instante de tempo  $t_0$ , o estado de um sistema físico é definido especificando-se um ket  $|\psi(t_0)\rangle$  que pertence ao espaço de estado  $\varepsilon$  do sistema.

Sendo  $\varepsilon$  o espaço vetorial de Hilbert. Vale notar que, o primeiro axioma implica no princípio da superposição, ou seja, a combinação linear de vetores de estado também é um vetor de estado.

- Descrição das Quantidades Físicas (Axioma 2)

Toda quantidade física  $\mathcal{A}$  é descrita por um operador  $A$ , atuando em  $\varepsilon$ ; este operador é um observável. O operador  $A$  é, por definição, um operador hermitiano, portanto:  $A = A^\dagger$ .

Esse postulado introduz uma diferença fundamental entre a mecânica clássica e a quântica: em mecânica quântica o estado físico de um sistema é representado por um vetor, enquanto uma quantidade física é representada por um operador.

- Medida das Quantidades Físicas (Axioma 3)

O único resultado possível da medida de uma quantidade física  $\mathcal{A}$  é um dos autovalores do observável correspondente  $A$ .

Como  $A$  é, por definição, hermitiano, uma medida de  $\mathcal{A}$  sempre resultará num valor real. Vale notar ainda que, se o observável  $A$  é discreto, isso implica na quantização dos resultados da medida.

- Princípio da Decomposição Espectral (Axioma 4)

Primeiro, vamos assumir que o espectro de  $A$  é inteiramente discreto. Se todos os autovalores  $a_n$  de  $A$  são não-degenerados, existe, então, um único autovetor  $|u_n\rangle$  associado a cada um deles, dessa forma:

$$A |u_n\rangle = a_n |u_n\rangle. \quad (7.17)$$

Como  $A$  é um observável, o conjunto de  $|u_n\rangle$ , o qual nós tomamos como normalizado, constitui uma base no espaço vetorial  $\varepsilon$ , dessa forma o vetor de estado  $|\psi\rangle$  do sistema, pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle. \quad (7.18)$$

É postulado então que, a probabilidade  $\mathcal{P}(a_n)$  de encontrar  $a_n$  em uma medida de  $\mathcal{A}$ , é:

$$\mathcal{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n | \psi \rangle|^2. \quad (7.19)$$

Caso de um Espectro Discreto Não-Degenerado: Quando a quantidade física  $\mathcal{A}$  é medida em um sistema com vetor de estado normalizado  $|\psi\rangle$ , a probabilidade  $\mathcal{P}(a_n)$  de obter o autovalor  $a_n$  não-degenerado do observável correspondente  $\mathcal{A}$  é:  $\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$ , sendo  $|u_n\rangle$  o autovetor normalizado de  $A$  associado ao autovalor  $a_n$ .

Consideraremos agora o caso em que os autovalores  $a_n$  são degenerados, com isso temos:

$$A |u_n^i\rangle = a_n |u_n^i\rangle; i = 1, 2, \dots, g_n \quad (7.20)$$

e  $|\psi\rangle$  pode ser expandido na base ortonormal  $\{|u_n^i\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle. \quad (7.21)$$

Neste caso, a probabilidade é definida por:

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2. \quad (7.22)$$

Caso de um Espectro Discreto e Degenerado: Quando a quantidade física  $\mathcal{A}$  é medida em um sistema com vetor de estado normalizado  $|\psi\rangle$ , a probabilidade  $\mathcal{P}(a_n)$  de obter o autovalor  $a_n$  do observável correspondente  $\mathcal{A}$ , é:

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2,$$

sendo  $g_n$  o grau de degenerescência de  $a_n$  e  $\{|u_n^i\rangle\} (i = 1, 2, \dots, g_n)$  é um conjunto de vetores que formam uma base no sub-espço  $\varepsilon_n$  associado com o autovalor  $a_n$  de  $A$ .

Por fim, consideraremos o caso em que o espectro de  $A$  é contínuo e, por simplicidade, não-degenerado.

Caso de um Espectro Contínuo e Não-Degenerado: Quando a quantidade física  $\mathcal{A}$  é medida em um sistema com vetor de estado normalizado  $|\psi\rangle$ , a probabilidade  $d\mathcal{P}(\alpha)$  de obter um resultado entre  $\alpha$  e  $\alpha + d\alpha$ , é:

$$d\mathcal{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2,$$

sendo  $|v_\alpha\rangle$  o autovetor de  $A$  associado ao autovalor  $\alpha$ .

- Redução do Pacote de Onda (Axioma 5)

Se a medida da quantidade física  $A$  em um sistema físico no estado  $|\psi\rangle$  fornece o resultado  $a_n$ , o estado do sistema imediatamente após a medida é a projeção normalizada,  $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$ , de  $|\psi\rangle$  no sub-espço  $\varepsilon_n$  associado ao autovalor  $a_n$ .

- Evolução Temporal (Axioma 6)

A evolução temporal de um vetor de estado  $|\psi(t)\rangle$  é governada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle,$$

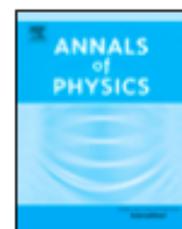
sendo  $H(t)$  o observável associado com a energia total do sistema.

## C. Artigo Publicado



Contents lists available at ScienceDirect

## Annals of Physics

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/aop](http://www.elsevier.com/locate/aop)

## Enhanced diode-like operation mediated by an asymmetric non-Hermitian and nonlinear defect



A. Nunes, W.S. Dias, M.L. Lyra \*

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

### HIGHLIGHTS

- Transmission along a quantum channel with a defect is analytically studied.
- The defect has non-Hermitian, nonlinear and non-symmetric characteristics.
- The transmission spectrum exhibits multistability regions.
- The non-conventional properties of the defect lead to a diode-like behavior.
- Multistability is shown to promote an enhanced rectification of the transmitted signal.

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 29 August 2017

Accepted 17 September 2017

Available online 23 September 2017

#### Keywords:

Non-Hermitian

Nonlinear

Wave transport

Rectification effect

### ABSTRACT

In this work we study the nonreciprocal transport along two tight-binding chains which are connected by a single defect having an asymmetric non-Hermitian nonlinear off-diagonal coupling. The spectrum of transmission and reflection, the gain curve and the rectifying factor are analytically obtained using a backward iterative process. A set of discrete linear Schroedinger equations is used to model the wave propagation through the two Hermitian side chains, while a discrete nonlinear Ablowitz–Ladik equation governs their coupling by the single defect. We show that the emergence of a multistability window induced by the non-linear contribution, together with the biased transport promoted by a parity-breaking non-Hermiticity, generates an efficient rectification of the transmitted wave component.

© 2017 Elsevier Inc. All rights reserved.

\* Corresponding author.

E-mail address: [marcelo@fis.ufal.br](mailto:marcelo@fis.ufal.br) (M.L. Lyra).

## 1. Introduction

Recently, investigations of transport phenomena in structured media have experienced a substantial revival envisaging the development of new devices with potential technological applications. These structures exhibit a wide range of quantum phenomena in the presence of magnetic fields including the quantum Hall [1–4], Faraday and Cotton–Mouton effects [5]. In particular, the study of such systems has boosted the design of new nano and mesoscopic devices that can perform unidirectional transport. Several advances have been put forward in a wide variety of quantum Hall systems, topological superconductors, diodes and insulators [6–9], with applications in quantum computing and spintronics. However, nonreciprocal transport via quantum Hall effect does not arise in one-dimensional systems.

Nelson and Hatano pioneered the study of Anderson localization in one-dimensional disordered non-Hermitian lattices [10]. The non-Hermiticity was introduced as resulting from an imaginary gauge field acting on the lattice sites. They showed that the presence of non-Hermiticity can prevent the Anderson localization. Such phenomenon, known as non-Hermitian delocalization, has been further studied by several authors [11–18]. The implementation of an imaginary gauge field is still a challenge in the condensed matter physics context. However, in optical devices this can be emulated by using a sequence of micro-resonator rings [19].

Motivated by non-Hermitian delocalization, some recent works have explored the transport properties in one-dimensional non-Hermitian lattices [20]. In these model systems, asymmetric transport is expected to arise because the time reversal symmetry (T) is broken. A propagating wave is amplified in one direction and damped in the opposite direction, thus leading to an optical diode-like effect. Tight-binding lattices have been widely used in several works that exploit transport properties [10,21,22], owing to their versatility, easy experimental implementation and the possibility to get exact results [23]. In general, non-Hermiticity can be introduced by the presence of an imaginary gauge field, complex on-site potentials or asymmetric hopping rates [21].

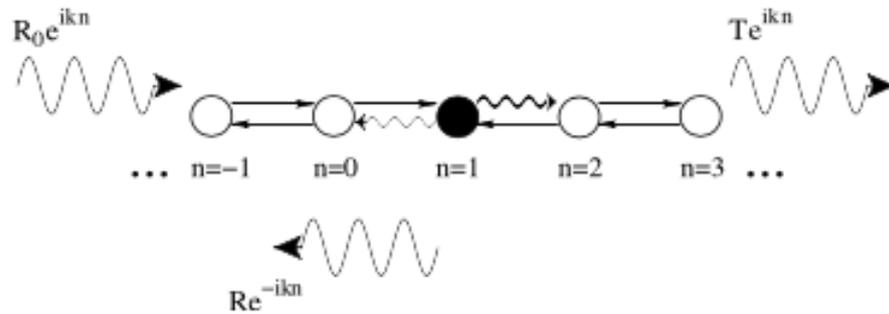
Nonreciprocal transport can also be achieved due to the presence of nonlinear contributions in systems with broken parity symmetry [5,18,24–27]. In electronic structures, the nonlinear effects arise from the underlying strong electron–phonon coupling. Such coupling may promote the emergence of a metal–insulator transition [28,29], which can be explored in proposals of new switching devices [30,31]. In optical systems, nonlinear terms originate from high-order contributions to the non-linear refractive index.

In the present work, we will be interested in investigating the possibility of obtaining an enhanced nonreciprocal transport in systems on which non-Hermiticity is induced by a nonlinear off-diagonal contribution to the wave propagation dynamics. In particular, we will consider the transport of harmonic waves along two Hermitian tight-binding chains which are connected by a single defect having an asymmetric nonlinear off-diagonal coupling. The non-Hermiticity will be introduced by nonlinear hopping rates from the defect site to their neighbors (see Fig. 1). Further, we will consider these nonlinear terms to be asymmetric in order to break the parity symmetry and promote a nonreciprocal wave transport. By modeling the coupling through the defect by a discrete Ablowitz–Ladik equation, we will explore the influence of the nonlinear response and the parity-breaking hopping rates on the multistability phenomenon and the resulting nonreciprocal behavior.

The work is organized as follows: in the next section we will introduce the model system investigated and describe the methodology used to compute the transmission and reflection rates. The full spectrum of the transmission coefficient will be analytically obtained from an exact backward iterative approach. In Section 3, we provide a detailed analysis of the transmission spectrum for distinct regimes of non-linearity and asymmetry, with special attention to the development of multistable behavior and its impact on the nonreciprocal transport. In Section 4, we summarize our work, draw our main conclusions and discuss on future perspectives.

## 2. Method

We will consider the transport of quantum harmonic waves through two Hermitian tight-binding chains which are connected by a single defect having an asymmetric nonlinear off-diagonal coupling



**Fig. 1.** Schematic representation of two linear side chains coupled by a single defective site. A plane wave incoming from the left side is scattered by the defect generating reflected and transmitted waves. In the present work the defect has an asymmetric non-Hermitian nonlinearity. Straight arrows stand for a unitary hopping amplitude. Wiggled lines incorporate a nonlinear contribution to the hopping term which is stronger towards the right side of the defect site.

(see Fig. 1). The system will be modeled by a discrete linear Schroedinger equation for the two Hermitian chains and a discrete Ablowitz–Ladik equation [32] to describe the time evolution of the wave amplitude at the defect. We start by expanding the state  $|\psi_n(t)\rangle$  of the system in the Wannier basis  $|n\rangle$ ,  $|\psi_n(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t)|n\rangle$ , where  $|n\rangle$  is a basis state located at the chain site  $n$ . The evolution of the wave amplitude  $\psi_n(t)$  for the two Hermitian tight-binding side chains is governed by the time-dependent linear Hermitian Schroedinger equation:

$$i \frac{d\psi_n(t)}{dt} = V_n \psi_n(t) + \psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t). \quad (1)$$

Here, the hopping rates between adjacent sites were set equal to unit and  $n \leq 0$  and  $n \geq 2$  represent the left and right semi-infinite chains. In what follows, we will use units of  $\hbar = 1$  and the energy the on-site potential on all sites of the linear chains  $V_n = 0$  as reference, without loss of generality.

The time evolution of the wave's amplitude at the defect will be considered to be governed by a non-linear non-Hermitian Ablowitz–Ladik equation, given by:

$$i \frac{d\psi_1(t)}{dt} = V \psi_1(t) + \psi_0(t) + \psi_2(t) + (1 - \varepsilon) \frac{\alpha}{2} |\psi_1(t)|^2 \psi_0(t) + (1 + \varepsilon) \frac{\alpha}{2} |\psi_1(t)|^2 \psi_2(t). \quad (2)$$

Site  $n = 1$  represents the nonlinear defect (see Fig. 1) with on-site energy  $V_1 = V$ . The parameter  $\alpha$  represents the strength of the nonlinear response, acting only within the central defect. Notice that the nonlinear contribution is present only on the hopping from the defect site to their neighbors. The hopping to the defect site remains unitary, as given by Eq. (1). This asymmetry between the hopping amplitudes from and to the defect site gives a non-Hermitian character to the systems dynamics. The introduction of asymmetric hopping rates was originally studied by Hatano and Nelson [10]. The experimental implementation of asymmetric hopping rates has already been done in optical systems as, for example, in coupled optical micro-ring resonators [19] and active mode-locked lasers [33]. Parity-breaking is controlled by the parameter  $\varepsilon$  that makes the nonlinear non-Hermitian contribution asymmetric between the defect site ( $n = 1$ ) and its adjacent sites ( $n = 0$  and  $n = 2$ ).

Eqs. (1) and (2) have stationary solutions  $\psi_n(t) = \psi_n e^{-iE(k)t}$ , where  $-\pi \leq k < \pi$  is the Bloch wavenumber and  $E(k) = e^{ik} + e^{-ik}$  is the energy dispersion curve in the linear regions. When a plane wave is inserted through the left side, it suffers scattering at the defect. Transmitted and reflected waves emerge after scattering. The solutions of Eqs. (1) and (2) for a plane wave coming from the left can be written by:

$$\psi_n = \begin{cases} R_0 e^{ikn} + R e^{-ikn}, & n \leq 1 \\ T e^{ikn}, & n \geq 1, \end{cases} \quad (3)$$

where  $R_0$ ,  $R$  and  $T$  are the incident, reflected, and transmitted amplitudes, respectively (see Fig. 1). To relate the incident and transmitted amplitudes, we used a backward iterative process of the time-independent discrete nonlinear Ablowitz–Ladik equation (2) to express the wave amplitude at site

$n = 0$  as

$$\psi_0 = \frac{[E(k) - V]\psi_1 - \psi_2 - (1 - \varepsilon)\alpha/2|\psi_1|^2\psi_2}{[1 + (1 - \varepsilon)\alpha/2|\psi_1|^2\psi_0]}. \quad (4)$$

The boundary condition at site  $n = 1$  with the left side chain provides

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

Using the backward iterative process and the condition of wavefunction continuity, we can also express  $\psi_0$  and  $\psi_1$  in terms of the transmitted amplitude  $T$ . After a straightforward algebra, the transmission coefficient can be written in a transcendental form, given by

$$t(k, |R_0|^2) = \frac{|T|^2}{|R_0|^2} = \frac{4\sin^2 k [1 + (1 - \varepsilon)t\alpha/2]^2}{4\sin^2 k + V^2 + t\alpha(4\sin^2 k + 2V \cos k + t\alpha)}. \quad (6)$$

Since the system is non-Hermitian, the scattering by the defect can result in gain or loss. Therefore, the reflection coefficient  $r$  has to be explicitly evaluated and, in general,  $t + r \neq 1$ . To obtain the reflection coefficient, we can follow similar steps as above, resulting in

$$r(k, |R_0|^2) = \frac{|R|^2}{|R_0|^2} = \frac{V^2 t + t^2 \alpha [2V \cos k + \alpha/2(t(1 - \varepsilon^2) \cos 2k + t(1 + \varepsilon^2))]}{4\sin^2 k |R_0|^2 [1 + (1 - \varepsilon)t\alpha/2]}, \quad (7)$$

with  $t$  obtained from Eq. (6). For the case of a plane wave coming from the opposite way, inserted through the right side, the above equations remain mainly the same, just changing the signal of  $\varepsilon$ . Hereafter, we will define  $t_L$  ( $r_L$ ) and  $t_R$  ( $r_R$ ) as the transmission (reflection) coefficient of waves coming from the left and from the right, respectively. To characterize the possibility of asymmetrical transmission, we will also analyze the behavior of the rectifying factor, defined as

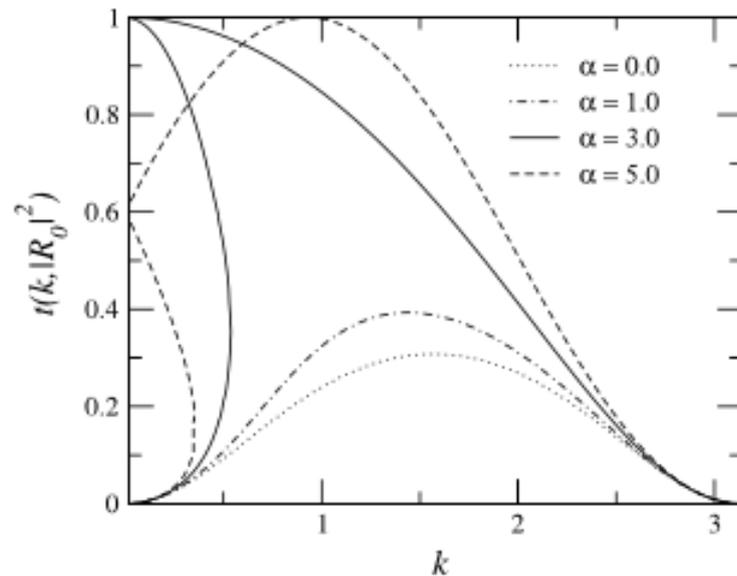
$$f_t(k, |R_0|^2) = \frac{t_L(k, |R_0|^2) - t_R(k, |R_0|^2)}{t_L(k, |R_0|^2) + t_R(k, |R_0|^2)}. \quad (8)$$

The rectifying factor for the reflected wave ( $f_r$ ) is defined similarly. Due to the nonlinear contribution, regions of multistability may appear with distinct solutions for a given wavevector  $k$ , as we will illustrate in the following section. In this case, the rectifying factor is computed by selecting the mode with largest transmission/reflection coefficients in the multistability region.

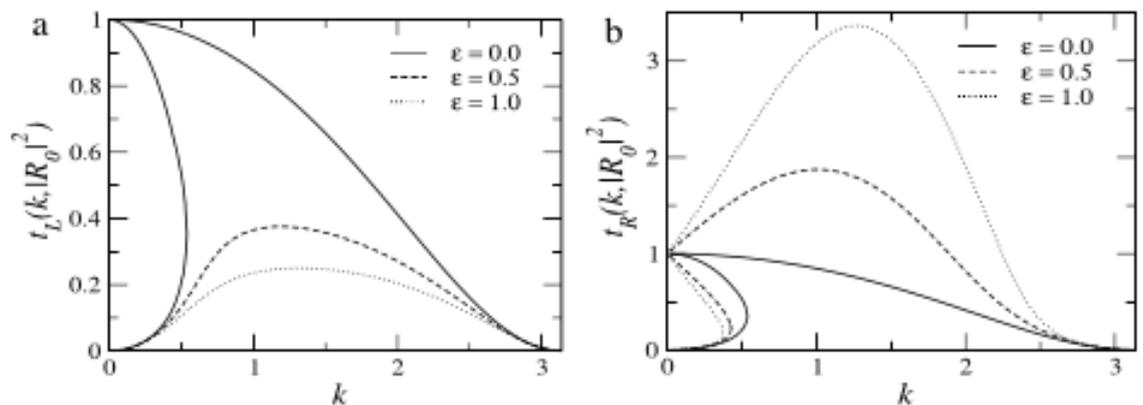
### 3. Results and discussion

In this section, we are going to report a detailed study of the transmission and reflection spectrum of the previously described model of non-Hermitian and nonlinear coupled chains, represented schematically in Fig. 1. In all cases we are going to consider in this section, we fixed  $|R_0|^2 = 1.0$  and the on-site potential  $V = -3.0$  for site  $n = 1$ . The results we are reporting are qualitatively similar for other parameter sets. Let us start our study by plotting the transmission coefficient as a function of the wavevector  $k$ , for a wave coming from the left side in the particular case of a parity-conserving nonlinear non-Hermitian defect. For this, we considered the hopping rates from the defect site to their neighbors to be equal, i.e.,  $\varepsilon = 0$ . The behavior of the  $t(k, |R_0|^2)$  would be the same for a wave coming from the right side, because the system, in this case, becomes spatially symmetric. We have considered distinct values of the nonlinearity parameter  $\alpha$ , as illustrated in Fig. 2. When the nonlinearity parameter  $\alpha$  is increased, one observes the emergence of a multistability region for small values of the wavevector  $k$ . In the multistability region, there are three modes of transmission for each incident wavenumber  $k$ . The multistability region becomes wider for larger nonlinearities. It starts from the uniform incident mode for  $\alpha > -V$ . At  $k = 0$ , the two extra modes have the same transmission coefficient  $t(0, |R_0|^2) = -V/\alpha$  for  $\alpha \geq -V$ , as shown in Fig. 2.

In the following, we are going to explore the possible occurrence of enhanced asymmetric transport through a one-dimensional tight-binding lattice with a central parity-breaking nonlinear non-Hermitian defect. Here, parity-breaking is introduced by unequal hopping rates between the



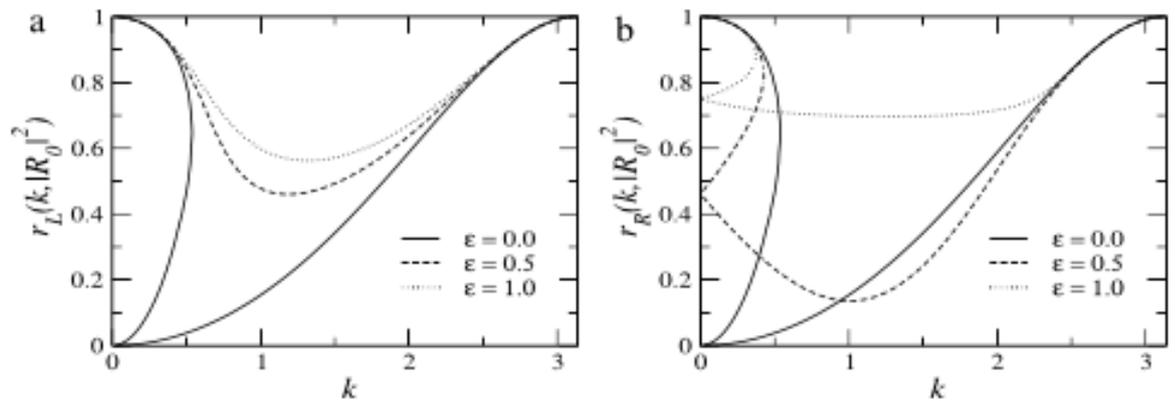
**Fig. 2.** Transmission coefficient spectrum as a function of the wavenumber  $k$  for distinct values of the nonlinearity parameter  $\alpha$  for the case of a parity-conserving non-Hermitian nonlinear defect. Multistability windows in the low  $k$  regime emerge at large  $\alpha$  values.



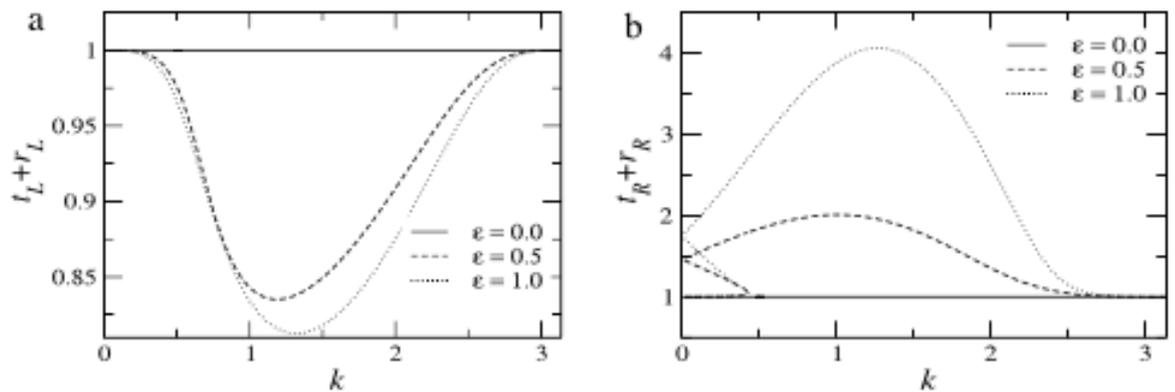
**Fig. 3.** Transmission coefficient as a function of the wavenumber  $k$  for distinct values of the parameter  $\epsilon$ . (a) Left side incidence; (b) Right side incidence. Notice that the window of multistability persists for the case of right incidence (b) while it fades with increasing asymmetries for the opposite case (a). Nonreciprocal transmission is achieved, specially in the multistability region.

defect and their adjacent sites ( $\epsilon \neq 0$ ). In Fig. 3, we plot the transmission coefficient as a function of wavevector  $k$  for distinct values of  $\epsilon$  and a fixed nonlinearity parameter  $\alpha = 3.0$ . For the case of a plane wave coming from the left side, Fig. 3a, we observe that the maximum transmission ( $t = 1.0$ ) occurs at  $\epsilon = 0$  and  $k = 0$ , i.e., when the lattice parity is symmetric. Notice that as the coefficient  $\epsilon$  grows, the transmission coefficient decreases. In Fig. 3b we show the same analysis for a plane wave coming from the right side. Here, we observe a reversed trend. The transmission predominantly increases for larger asymmetries (larger values of  $\epsilon$ ). In the multistability region, this is the behavior depicted by the mode with maximum transmission. Notice that the transmission coefficient can become larger than unit for  $\epsilon > 0$ . This is associated with an intrinsic gain, as it will be discussed below.

In Fig. 4a, we plot the reflection coefficient  $r$  as a function of wavenumber  $k$  for a plane wave incident from the left side and with  $\alpha = 3.0$ . One observes that the reflection coefficient increases and the multistability is suppressed when the asymmetry parameter  $\epsilon$  grows. The extra modes appearing



**Fig. 4.** Reflection coefficient as a function of the wavenumber  $k$  for distinct values of the parameter  $\epsilon$ . (a) Left side incidence; (b) Right side incidence. The extra modes in the multistability window have reflection coefficients approaching unit for left side incidence. Nonreciprocal reflection is also achieved, but in a smaller degree than that exhibited by the transmitted wave component (see Fig. 3).



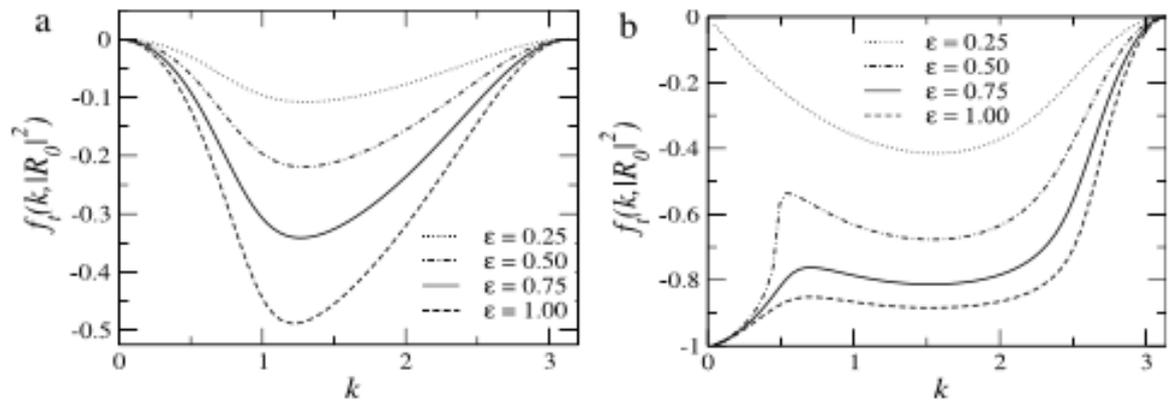
**Fig. 5.** Total relative intensity of the scattered wave (transmitted and reflected) as a function of the wavenumber  $k$  for distinct values of the parameter  $\epsilon$  and  $\alpha = -V = 3.0$ . (a) A plane wave coming from the left side exhibits power loss ( $t + r < 1$ ) for parity-breaking non-Hermitian couplings. (b) Power gain takes place for the case of right side incidence.

in the multistability region induced by the underlying nonlinearity have a vanishing reflection in the limit  $k \rightarrow 0$ . These extra modes have a finite reflection in the low- $k$  regime for larger nonlinearities.

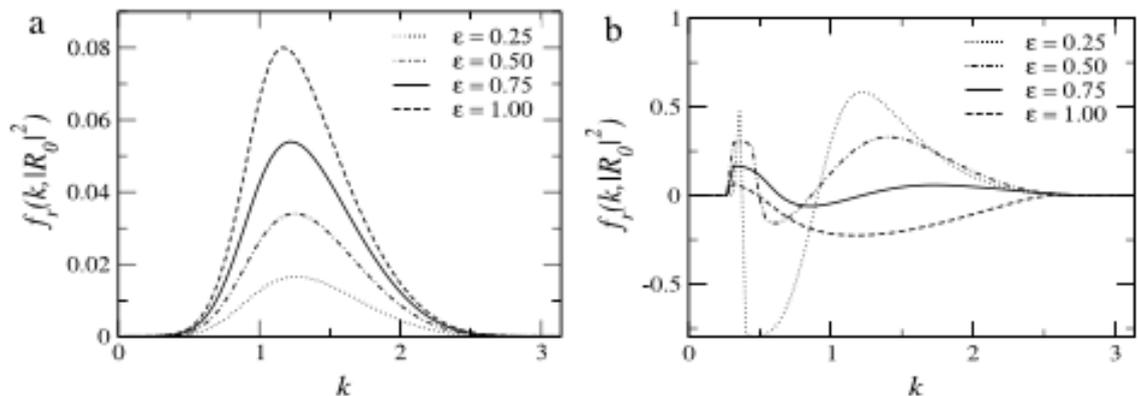
For a wave inserted from the right side, Fig. 4b, the reflection coefficient also exhibits a general tendency of becoming larger for higher asymmetries. However, the multistability region persists with the reflection coefficient of the extra modes approaching to unit as  $\epsilon$  increases. Notice that, contrary to the possibility of having a transmitted wave of intensity larger than the incident one (see Fig. 3b where  $t > 1$ ), the reflected wave is always less intense than the incoming wave.

The possibility of power gain or loss is a general trend of parity-breaking non-Hermitian wave propagation [13,19]. In the present model of asymmetric non-Hermitian nonlinear coupled chains, we can characterize this aspect by computing the total relative intensity of the scattered waves  $t + r$  for distinct values of the asymmetry parameter  $\epsilon$ . Illustrative spectra of the total relative intensity are shown in Fig. 5 for both cases of (a) left and (b) right side incidence. In general, power loss takes place when the wave reflected in the parity-breaking non-Hermitian defect experiences a smaller hopping amplitude than the transmitted wave, as shown in Fig. 5a. In the opposite case of incidence from the side with larger non-Hermitian hopping (Fig. 5b), a pronounced power gain is developed.

The distinct spectra of transmission for waves coming from different sides of the parity-breaking non-Hermitian nonlinear defect indicate the possibility of an efficient diode-like operation with the wave transmission in one direction being much more pronounced than in the other. To explore this



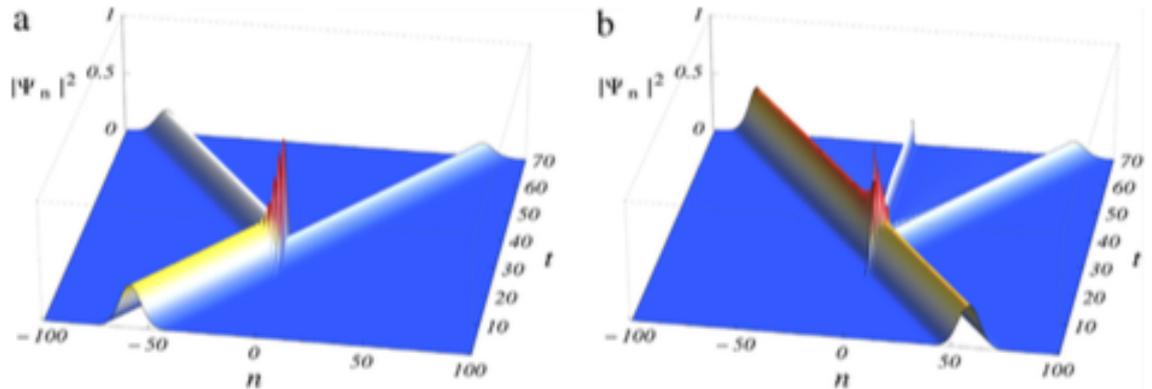
**Fig. 6.** Rectifying factor for transmission  $f_t$  as a function of the wavenumber  $k$  for distinct values of the parameter  $\epsilon$ . Different values of the nonlinearity parameter  $\alpha$  were considered [(a)  $\alpha = 1.0$  and (b)  $\alpha = 5.0$ ]. Efficient rectification is achieved in the regime of large nonlinearity and asymmetry.



**Fig. 7.** Rectifying factor  $f_r$  for the reflection coefficient as a function of the wavenumber  $k$  for distinct values of the parameter  $\epsilon$ . Different values of the nonlinearity parameter  $\alpha$  were considered [(a)  $\alpha = 1.0$ ; (b)  $\alpha = 5.0$ ]. Relatively efficient rectification is restricted to narrow spectral regions in the regime of strongly nonlinear but weakly asymmetric non-Hermitian defect.

aspect, we plot in Fig. 6 the rectification factor spectra for the transmitted wave for two representative values of the nonlinear coefficient  $\alpha$ . For small nonlinearities (Fig. 6a) the rectification is not much efficient, although growing when larger asymmetries are considered. The physical origin of this behavior is related to fact that there is no multistability in this regime when the system is weakly asymmetric. A very strong asymmetry would be required to induce multistability for the case of right-side incidence needed to develop an efficient rectification effect. A new scenario emerges for the case of strong nonlinearities, as illustrated in Fig. 6b. Rectification is also small at weak asymmetries. However, this is due to a distinct underlying mechanism. In this case, multistability is present for both left and right-side incidences. Increasing the asymmetry leads to a pronounced multistability for the right-side incidence while multistability fades for the opposite incidence. As a result, a pronounced rectification develops, specially in the regime of small wavevectors. It is worth to emphasize that an efficient rectification is reached in a wide spectral region for strong asymmetries. This feature indicates that a diode-like behavior can also take place for wavepackets composed of many harmonic components. Only harmonic components with very short wavelengths are not efficiently rectified.

We also report a similar analysis of the rectification efficiency for the reflected wave component. In the case of weak nonlinearity (Fig. 7a), rectification of the reflected wave is very inefficient because the reflection coefficient is large at weak asymmetries for both incidence directions. The development of multistability does not promote a substantial increase of  $f_r$  because the new extra modes have low reflection coefficients. More complex rectification spectra for the reflected component appears at



**Fig. 8.** Time-evolution of a Gaussian wavepacket traveling towards the asymmetric nonHermitian nonlinear defect site located at  $n = 1$ . Top panel: Left-side incidence; Bottom panel: Right-side incidence. A significant nonreciprocal transmission is achieved with a higher degree for the right-side incidence. Notice, in this case, some degree of power gain and the partial trapping around the defect. Parameters are  $V = -3$ ,  $\alpha = 3$ ,  $\epsilon = 0.5$ ,  $A = 0.6$ ,  $\sigma = 5$ ,  $n_0 = \pm 60$  and  $k = \pm\pi/2$ .

strong nonlinearities where multistability is present for both incidence directions in the low- $k$  regime. However, the rectification efficiency remains predominantly low, except in narrow spectral regions delimiting the region at which multistability remains just for the case of right-side incidence. Notice that  $f_r$  changes sign signaling that both left and right-side predominant reflections take place.

Before finishing, we explicitly followed the time evolution of a Gaussian wavepacket incident from the left and from the right side of the defect. To this end, we solved numerically the set of time-dependent linear Schroedinger equations holding at the linear sites together with the asymmetric nonlinear Ablowitz–Ladik equation at the defect site. We considered an initial wavepacket of the form:

$$\Psi_n(0) = Ae^{-(n-n_0)^2/4\sigma^2} e^{ikn}, \quad (9)$$

where  $A$  is the wavepacket amplitude,  $\sigma$  its width,  $n_0$  its central initial position and  $k$  an overall wavevector that governs the wavepacket velocity. In Fig. 8, we illustrate the scattering of the wavepacket by the defect using as an illustrative set of parameters  $V = -3$ ,  $\alpha = 3$ ,  $\epsilon = 0.5$ ,  $A = 0.6$ ,  $\sigma = 5$ ,  $n_0 = \pm 60$  and  $k = \pm\pi/2$ . For the case of left side incidence (for which the reflected wave experiences a smaller nonlinear contribution to hopping than the transmitted wave), the transmitted component is weaker than the reflected one, as shown in Fig. 8a. On the other hand, the wave is predominantly transmitted for the opposite incidence direction. Notice that, in this case, some degree of wave amplification is achieved. These features corroborate the previous spectral analysis. Further, a fraction of the wavepacket becomes trapped near the defect due to its strongly nonlinear nature.

#### 4. Summary and conclusions

In summary, we analytically determined the stationary state solution for plane waves dwelling in a tight-binding chain with a nonlinear parity-breaking non-Hermitian defect. The defect was modeled by the Ablowitz–Ladik equation having a nonlinear hopping term connecting it to otherwise linear side chains. Non-Hermiticity was introduced by considering the nonlinear contribution to be present only in the hopping amplitude from the defect to their neighboring sites. Parity-breaking of such nonlinear contribution to the hopping was also considered to investigate the emergence of nonreciprocal transport. We employed a backward iterative process to exactly compute the transmission and reflection spectra for plane waves of wavevector  $k$ . Both cases of left and right side incidences were considered. In particular we explored the possibility of achieving a diode-like operation due to the combined effect of non-Hermiticity and parity-breaking nonlinearity. The non-Hermitian parity-breaking generates power gain and loss, as well as some degree of asymmetric transmission. This behavior is strongly enhanced when nonlinearity promotes the emergence of multistability. We reported the spectra of rectification factors for both the transmitted and reflected

wave components. Efficient rectification of the transmitted component was reached in the regime of a strongly asymmetric non-Hermitian and nonlinear defect, except for waves with very short wavelengths. We also showed that Gaussian wavepackets are also efficiently rectified. On the other hand, the rectification factor of the reflected component exhibits a complex form with a significant efficiency limited to short spectral regions. The main aspects of the reported results are expected to hold for the transport properties associated to general wave-like phenomena, such as acoustic, magnetic, optical and electrical excitations. In this sense, parity-breaking non-Hermitian nonlinear couplers appear as interesting candidates to tailor a new class of devices with potential technological applications.

### Acknowledgments

We would like to thank partial financial support from CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), CNPq (grant number 304852/2015-5); (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), and FAPEAL (grant number 60030 000034/2014) (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas).

### References

- [1] R.E. Prange, S.M. Girvin, M.E. Cage, *The Quantum Hall Effect*, Springer, Berlin, 1986.
- [2] D.C. Tsui, H.L. Stormer, A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* 48 (1982) 1559.
- [3] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, *Science* 318 (2007) 766.
- [4] K.S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S.V. Morozov, H.L. Stormer, U. Zeitler, J.C. Maan, G.S. Boebinger, P. Kim, A.K. Geim, *Science* 315 (2007) 1379.
- [5] S.R. Sklan, *AIP Adv.* 5 (2015) 053302.
- [6] H. Zhao, W.S. Fegadolli, J. Yu, Z. Zhang, L. Ge, A. Scherer, L. Feng, *Phys. Rev. Lett.* 117 (2016) 193901.
- [7] M.Z. Hasan, C.L. Kane, *Rev. Modern Phys.* 82 (2010) 3045.
- [8] T.F. Assunção, E.M. Nascimento, M.L. Lyra, *Phys. Rev. E* 90 (2014) 022901.
- [9] X.L. Qi, S.C. Zhang, *Rev. Modern Phys.* 83 (2011) 1057.
- [10] N. Hatano, D.R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 570.
- [11] N. Moiseyev, *Phys. Rep.* 302 (1998) 212.
- [12] P.W. Brouwer, P.G. Silvestrov, C.W.J. Beenakker, *Phys. Rev. B* 45 (1997) 8.
- [13] S. Longhi, *Phys. Rev. A* 94 (2016) 022102.
- [14] J.G. Muga, J.P. Palao, B. Navarro, I.L. Egusquiza, *Phys. Rep.* 395 (2004) 357.
- [15] I. Rotter, *J. Phys. A* 42 (2009) 153001.
- [16] N. Moiseyev, *Non-Hermitian Quantum Mechanics*, Cambridge University, Cambridge, UK, 2011.
- [17] C.M. Bender, S. Boettcher, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 5243.
- [18] C.M. Bender, *Rep. Progr. Phys.* 70 (2007) 947.
- [19] S. Longhi, D. Gatti, G.D. Valle, *Sci. Rep.* 5 (2015) 13376.
- [20] S. Longhi, D. Gatti, G.D. Valle, *Phys. Rev. B* 92 (2015) 094204.
- [21] D.E. Pelinovsky, P.G. Kevrekidis, D.J. Frantzeskakis, *Europhys. Lett.* 101 (2013) 11002.
- [22] M. Znojil, *J. Phys. A* 40 (2007) 13131.
- [23] T. Eichelkraut, R. Heilmann, S. Weimann, Stützer, F. Dreisow, D.N. Christodoulides, S. Nolte, A. Szameit, *Nature Commun.* 4 (2013) 2533.
- [24] S. Lepri, G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 164101.
- [25] M.W. Feise, I.V. Shadrivov, Y.S. Kivshar, *Phys. Rev. E* 71 (2005) 037602.
- [26] M.D. Tocci, M.J. Bloemer, M. Scalora, J.P. Dowling, C.M. Bowden, *Appl. Phys. Lett.* 66 (1995) 2324.
- [27] Y. Li, J. Zhou, F. Marchesoni, B. Li, *Sci. Rep.* 4 (2014) 4566.
- [28] A.S. Mishchenko, N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 036402.
- [29] F.A.B.F. de Moura, I. Gleria, I.F. dos Santos, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 096401.
- [30] H. Wang, X. Yu, X. Rong, *Opt. Eng.* 54 (2015) 077101.
- [31] T.F. Assunção, E.M. Nascimento, A.S.B. Sombra, M.L. Lyra, *Phys. Rev. E* 93 (2016) 022218.
- [32] M.J. Ablowitz, J.F. Ladik, *Stud. Appl. Math.* 55 (1976) 213.
- [33] B.A. Khawaja, M.J. Cryan, *Microw. Opt. Technol. Lett.* 54 (2012) 1200.