



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

JOSÉ FRANCISCO ALVES DE SOUSA

INSTABILIDADE MODULACIONAL E AUTO-ARMADILHAMENTO EM
CADEIAS COM INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE ENTRE ÍONS.

MACEIÓ - AL

2019

JOSÉ FRANCISCO ALVES DE SOUSA

TESE DE DOUTORADO

INSTABILIDADE MODULACIONAL E AUTO-ARMADILHAMENTO EM CADEIAS COM
INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE ENTRE ÍONS.

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias

MACEIÓ - AL

2019

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

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto - CRB-4 - 1767

S725i	<p>Sousa, José Francisco Alves de.</p> <p style="padding-left: 40px;">Instabilidade Modulacional e Auto-armadilhamento em cadeias com interação de longo alcance entre íons./ José Francisco Alves de Sousa.-2019.</p> <p style="padding-left: 40px;">60.: il.</p> <p style="padding-left: 40px;">Orientador: Wandearley da Silva Dias .</p> <p style="padding-left: 40px;">Tese (doutorado em Física) - Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2019.</p> <p style="padding-left: 40px;">Bibliografia: f. 52 - 60.</p> <p style="padding-left: 40px;">1. Instabilidade modulacional. 2. Interação elétron-rede. 3. Não-linearidade I. Título.</p> <p style="text-align: right; margin-top: 20px;">CDU: 538.915</p>
-------	---



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

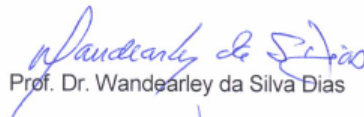
***“Instabilidade Modulacional e Auto-armadilhamento em
cadeias com interação de longo alcance entre íons”***

por

José Francisco Alves de Sousa

A Banca Examinadora composta pelos professores Wandearley da Silva Dias (presidente da banca e orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Hugo Nicolas Nazareno, da Universidade de Brasília, Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Paulo Eduardo de Brito, da Universidade de Brasília consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 3 de julho de 2019


Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias


Prof. Dr. Hugo Nicolas Nazareno


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito

À MINHA ESPOSA, JANYELLE,
E MINHAS FILHAS, HELOÍSA &
DÉBORAH.

Agradecimentos

- Primeiramente agradeço a Deus pelo dom da vida, que por seu infinito amor e bondade nos concedeu.
- Aos meus pais, seu João Ferreira e dona Maria da Conceição, por doar suas vidas em detrimento da minha e de meus irmãos, Maria Antônia, Antônio Marcos, Ana Paula e João Henrique. Amo-os.
- À minha esposa Janyelle Gomes pela compreensão e dedicação dispensadas a mim em momentos oportunos e inoportunos. Prometo retribuir-te a ti e à nossas filhas o amor e cuidado necessários todos os dias.
- Ao professor Wandearley da Silva Dias pela paciência e acolhimento que foram abundantes em minha orientação, sem palavras para agradecer as ricas discussões e toda ajuda que recebi durante este tempo. Muito obrigado professor!
- Ao Grupo de Física Teórica e Computacional (GFTC), a todos os professores e colegas de grupo. Em particular, meus sinceros agradecimentos aos amigos Denilson de Moraes Silva e Luciano José Rêgo Bezerra Júnior pelas ricas e proveitosas discussões acerca do trabalho, e também pelas horas de resenha.
- Ao Coordenador do Dinter-IFPI Ricardo Duarte e aos amigos Antônio Carlos, Alex, Herbert, José e Nogueira pela parceria.
- Ao Instituto Federal do Piauí e ao Programa de Pós Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas pela oportunidade e recursos necessários para minha formação.

Resumo

Neste trabalho investigamos a instabilidade modulacional (IM) de uma função de onda eletrônica, próxima ao estado estacionário, numa rede discreta unidimensional (1D) onde levamos em conta um termo cinético (*hopping*) de longo alcance. Neste caso o termo de *hopping* decai com a distância entre pontos da cadeia segundo uma lei de potência do tipo $|i - j|^{-\alpha}$, com α modulando esta interação. Os resultados numéricos mostraram que para α grande recuperamos o caso de *hopping* de curto alcance (primeiros vizinhos). Neste caso o parâmetro crítico característico χ_{IM} , acima do qual a solução da onda torna-se instável, escala linearmente como o inverso do tamanho L da cadeia. No intervalo $3 < \alpha \leq 10$ mostramos que a densidade de probabilidade eletrônica tende a ser estável, uma vez que χ_{IM} torna-se maior com decréscimo do expoente α . Observamos que para $\alpha = 2$ o tamanho L da cadeia passa a não influenciar na instabilidade da função de onda eletrônica. Tal resultado, característico de sistemas bidimensionais com *hopping* de primeiros vizinhos, corrobora com a análise de dimensionalidade efetiva do sistema realizada analiticamente. No último intervalo, $1 < \alpha < 2$, ocorre uma mudança no comportamento do parâmetro crítico χ_{IM} em relação ao tamanho da cadeia, que passa a crescer com o aumento de L . Portanto, o pacote de onda do elétron tende a permanecer estável, exceto para grandes valores do acoplamento efetivo da não linearidade. Além disso, mapeamos para vários valores do expoente do *hopping* os regimes onde a função de onda apresenta o caráter estendido, com respirações periódicas (*breathers*), respirações aleatórias (dinâmica tipo caótica), bem como o estado de total localização (*selftrapping*). Em suma, uma análise de dimensionalidade efetiva sobre a instabilidade modulacional do estado CW do sistema mostrou que a estabilidade ocorre para $\alpha \leq 3$ com $\chi_{IM} \propto N^{2-\alpha}$. O regime de instabilidade emerge para $\alpha \geq 3$ com $\chi_{IM} \propto N^{-1}$. Os resultados numéricos

obtidos concordam com esta análise analítica da dimensionalidade espectral do sistema.

Palavras-chave: 1. Análise de estabilidade. 2. Interação elétron-rede. 3. Não linearidade. 4. *Hopping* de longo alcance.

Abstract

In this work we investigate the modulational instability (MI) of a electronic wave function near to steady state in a discrete one-dimensional lattice where take into account a long-hopping kinetic term. This hopping term decays with the distance between points of the chain under power law as $|i - j|^{-\alpha}$ characterized by α exponent modulating this interaction. The numerical results show that for large α reproduce the short-range hopping (first neighbors) case. In this specific case the characteristic critical parameter χ_{MI} of MI, above which the wave solution becomes unstable, scales linearly as the inverse of the size L of chain. In range $2 < \alpha < 10$ the electronic probability density remains to be stable, because χ_{MI} becomes larger as the exponent α decreases. Observed that for $\alpha = 2$, the size L of the chain doesn't influence in instability of the electronic wave function. This result, characteristic of two-dimensional systems, corroborates whit analytical analysis of effective dimensionality of the system. In the last range, $1 < \alpha < 2$, a transition that occurs in the behavior of the parameter critical χ_{MI} relative to the size of the chain, that now grows with increasing L . Therefore the electronic wave packet remains stable except for large values to effective coupling of non-linearity. Besides that, we mapped to several values of the hopping exponent where the wave function presents the extended character, breathers, chaotic dynamics as well as self-trapping state of localization. An effective dimensionality analysis of the modulational instability of the CW state of the system showed that stability occurs $\alpha \leq 3$ with $\chi_{IM} \propto N^{2-\alpha}$. The instability regime emerges for $\alpha \geq 3$ with $\chi_{IM} \propto N^{-1}$. The numerical results obtained corroborated this analytical analysis of the spectral dimensionality of the system.

Key-words: 1. Stability analysis. 2. Electron-lattice interaction. 3. Non-linearity. 4. Long-range *hopping*.

Lista de Figuras

1.1	(a) Aparato experimental composto por um sistema de armadilha magneto- óptica (MOT, do inglês <i>magneto-optical trapping</i>) com átomos ultrafrios de ^{85}Rb e um guia de onda óptico. (b) trem de sólitons observados após 100ms de pro- pagação de um BEC em um guia de onda óptico. (c) Instabilidade Modulacio- nal num modelo unidimensional: (i)um estado inicialmente localizado torna-se (ii)modulado por um ruído instável que (iii) cresce exponencialmente produzindo um trem de sólitons.	3
1.2	Evolução temporal da densidade de probabilidade normalizada $ \psi ^2/N$ (no topo), da autocorrelação $A(z)$ (no meio) da densidade de um BEC e da largura do pico central da Autocorrelação $A(z)$ (abaixo), simulados numericamente e submetido a uma IM (reproduzido em adequações com as condições e parâmetros experi- mentais).	4
1.3	Imagem de 16 íons presos com uma distância de $30\mu\text{m}$ entre o primeiro e o último íon.	5
2.1	Parte de uma molécula de <i>trans</i> -poliacetileno com cadeia dimerizada.	11
2.2	Processo e elementos da instabilidade modulacional numa fibra óptica com não linearidade tipo Kerr no regime de dispersão anômala.	23
2.3	(a) Número de participação normalizado em função do tempo para uma cadeias com 40 e 50 sítios para $\chi = 0.45$. (b) Estimativa numérica de χ_c que separa os regimes estável e instável em função do tamanho das cadeias.	26

2.4	(a) Número de participação normalizado em função do tempo de uma topologia tipo fulereno C_{60} para $\chi = 7.0$ e $\chi = 7.5$. O resultado mostra que em $\chi = 7.0$ o pacote de onda permanece estável e em $\chi = 7.5$ o pacote localiza em torno de uma fração de sítios da estrutura. (b) Estimativa numérica de χ_c que separa os regimes estável e instável em função do número de sítios nas estruturas de fulerenos (<i>bulkballs</i>).	27
2.5	(a) Evolução temporal do número de participação normalizado numa cadeia 1D de 100 sítios exibindo os regimes estendido ($\chi = 0.195$), <i>breathers</i> ($\chi = 0.280$) e aprisionado ($\chi = 4.500$) da função de onda. (b) Estimativa numérica do parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus tamanho da cadeia. A linha tracejada refere-se a estimativa analítica prevista na equação 2.77.	33
2.6	Evolução temporal da distribuição de probabilidades da função de onda em uma cadeia com $N = 100$ sítios para alguns valores do acoplamento efetivo acima da transição da instabilidade modulacional. $\chi = 0.290$: Logo acima da transição da IM, um padrão bastante regular respirante ocorre entre o estado uniforme e o localizado. $\chi = 1.0$: A respiração torna-se mais complexos com oscilações entre estados localizados distintos. $\chi = 3.0$: Como uma parte adicional da IM, oscilações do tipo caóticas entre vários estados localizados são desenvolvidas. $\chi = 4.5$: Acima de χ_{ST} uma solução localizada estacionária emerge após um tempo transiente com oscilações do tipo caóticas.	34
3.1	Evolução temporal do número de participação normalizado numa cadeia 1D de 101 sítios exibindo os regimes estendido ($\chi = 0.195$), <i>breathers</i> ($\chi = 0.500$), oscilação aleatória ($\chi = 3.000$) e aprisionado ($\chi = 6.000$) da função de onda para $\alpha = 10$	39
3.2	Estimativa numérica do parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus tamanho da cadeia para $\alpha = 10$	40
3.3	Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia de 101 sítios considerando $\alpha = 10$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 0.195$), (b) <i>breathers</i> ($\chi = 0.280$), (c) transiente ($\chi = 3.000$) e (d) aprisionado ($\chi = 6.000$).	41

3.4	Evolução temporal do número de participação numa cadeia de 101 sítios considerando (a) $\alpha = 3$ e (b) $\alpha = 2$ exibindo os regimes estendido, <i>breathers</i> , transiente e aprisionado da função de onda.	42
3.5	Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia de 101 sítios considerando $\alpha = 3.0$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 0.810$), (b) <i>breathers</i> ($\chi = 0.900$), (c) transiente ($\chi = 3.000$) e (d) aprisionado ($\chi = 6.000$).	43
3.6	Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia 1D de 101 sítios considerando $\alpha = 2.0$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 7.538$), (b) e (c) <i>breathers</i> ($\chi = 7.545, 7.550$) e (d) aprisionado ($\chi = 7.551$).	44
3.7	Evolução temporal do número de participação normalizado numa cadeia 1D de 100 sítios exibindo os regimes estendido ($\chi = 17.524$) e aprisionado ($\chi = 17.525$) da função de onda para $\alpha = 1.750$	45
3.8	Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia de 101 sítios considerando $\alpha = 1.75$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 15.524$), (b), (c) e (d) aprisionado ($\chi = 15.525, 15.526, 15.527$).	46
3.9	Diagrama mostrando o número de participação mínimo local em função de χ resultante da dinâmica de um pacote de onda eletrônico inicialmente uniforme numa cadeia discreta com 101 sítios para diversos valores do expoente do <i>hopping</i> : (a) $\alpha = 10$, (b) $\alpha = 3$, (c) $\alpha = 2$ e (d) $\alpha = 1.75$	47
3.10	(a) Estimativa numérica do parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus tamanho da cadeia para diversos valores de α (1.50, 1.75, 2.00, 2.25, 3.00, 8.00 e 10.00). (b) Relação entre o parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus expoente α para diversos tamanhos de cadeias ($L = 51, 101$ e 201).	49

Sumário

Agradecimento	v
Resumo	vi
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
2 Formalismo e Modelos teóricos	8
2.1 Interação elétron-rede	8
2.2 Modelo de Holstein	12
2.3 Interação de longo alcance	18
2.3.1 Interação com decaimento tipo lei de potência	19
2.4 Instabilidade Modulacional e a ENLDS	21
2.4.1 Análise da Estabilidade na dinâmica eletrônica	25
2.4.2 Instabilidade modulacional e auto-armadilhamento	32
3 Instabilidade Modulacional numa cadeia com <i>hopping</i> de longo alcance	36
3.1 Descrição do modelo	36
3.2 Resultados	38
4 Conclusões e Perspectivas	50
Referências Bibliográficas	52

Introdução

O fenômeno de Instabilidade Modulacional (IM) é caracterizada pela amplificação de uma pequena perturbação (ruído) na amplitude de uma onda, que cresce exponencialmente em razão de uma combinação entre contribuições não lineares e efeitos dispersivos do meio. A instabilidade modulacional tem sido reportada em diversos sistemas, como em Óptica não linear [1], Condensados de Bose-Einstein[2,3] e Física de Plasma [4]. Além disso, tem-se mostrado amplamente que tal fenomenologia está associada com a quebra de onda contínua¹ (*continuous wave* - CW), transformando-a num trem de pulsos solitônicos [5,6]. Estas ondas solitônicas podem se propagar por longas distâncias sem sofrer quaisquer distorções e são de grande interesse tecnológico no campo da comunicação [7-9].

Do ponto de vista histórico, por volta da década de 1960, o fenômeno da IM foi previsto por Bephalov e Talanov através de um estudo sobre a propagação da luz em líquidos com propriedades não lineares [10]. Pouco tempo depois a mesma fenomenologia foi observada em águas profundas por Benjamin e Feir [11]. No contexto eletrônico um importante trabalho foi desenvolvido por P. Marquié *et al* (1995) no qual os autores observaram a formação de sólitons em redes elétricas reais devido um processo de instabilidade modulacional [12].

A IM tem origem na não linearidade. Como dito anteriormente, nos meios em que está presente este tipo de efeito, em geral, uma pequena perturbação adicionada a um estado estacionário (CW) do sistema pode crescer rapidamente até atingir um valor de saturação. Ao atingir esse estágio o sistema evolui para soluções oscilatórias de modos localizados (*breathers*) [13], podendo até culminar na formação da onda solitária

¹Onda ou pulsos com frequência, potência média e amplitude constantes.

[2, 14, 15]. Em geral, tanto no contexto da Óptica Não Linear, em Condensação de Bose-Einstein (*Bose-Einstein Condensation/Condensate* - BEC), como também no transporte eletrônico em Sistemas de Baixa Dimensionalidade com interação elétron-rede, a presença de termos não lineares nas equações da dinâmica destes sistemas físicos podem levar a soluções com uma diversidade de comportamentos. A dinâmica pode apresentar modos oscilatórios temporal ou espacialmente localizados (*breathers*)[16], amplificação de ruídos (instabilidade modulacional)[17], soluções tipo sólitons [18–20] e até mesmo apresentar um comportamento de dinâmica caótica [13]. A evolução desses sistemas é regida por equações semelhantes, conhecidas como Equações Não Lineares de Schrödinger (ENLS), que dentro das aproximações pertinentes e interpretadas adequadamente em cada contexto descreve-os analogamente de maneira satisfatória.

Alguns recentes resultados experimentais e teóricos em condensados de Bose-Einstein têm mostrado a relevância da Instabilidade Modulacional na dinâmica de formação de sólitons nesses sistemas [21–23]. Mais especificamente destacamos a referência [22], onde um estudo teórico e experimental da Instabilidade Modulacional em um BEC foi realizado, no qual foi observado a formação de sólitons. A abordagem experimental deste trabalho foi baseada numa armadilha magneto-óptica para confinar átomos de ^{85}Rb advindos de um processo de evaporação. Neste caso, os átomos ficam restritos a um confinamento aproximadamente unidimensional através de um guia de onda óptico que possui potencial harmônico repulsivo. A Figura 1.1 mostra esquematicamente o aparato experimental utilizado no trabalho. Os resultados revelaram a formação da quebra do BEC em componentes espacialmente localizadas, sendo do tipo sóliton e estáveis sob uma propagação por mais de 90ms.

A abordagem teórica feita pelos autores foi construída com base num modelo efetivo unidimensional da Equação de Gross-Pitaevskii [24] que forneceu uma compreensão análoga às observações experimentais feitas. A função de onda $\Psi(x, y, z, t)$ do sistema pode ser fatorada em duas componentes uma transversal e outra longitudinal, na forma:

$$\Psi(x, y, z, t) = f(z, t) \phi(x, y, t; f(z, t)) \quad . \quad (1.1)$$

A dinâmica do modelo de interesse está na componente axial $f(z, t)$, uma vez que o movimento do sistema está restrito aproximadamente à direção z , e cuja evolução é

Figura 1.1: (a) Aparato experimental composto por um sistema de armadilha magneto-óptica (MOT, do inglês *magneto-optical trapping*) com átomos ultrafrios de ^{85}Rb e um guia de onda óptico. (b) trem de sólitons observados após 100ms de propagação de um BEC em um guia de onda óptico. (c) Instabilidade Modulacional num modelo unidimensional: (i) um estado inicialmente localizado torna-se (ii) modulado por um ruído instável que (iii) cresce exponencialmente produzindo um trem de sólitons.

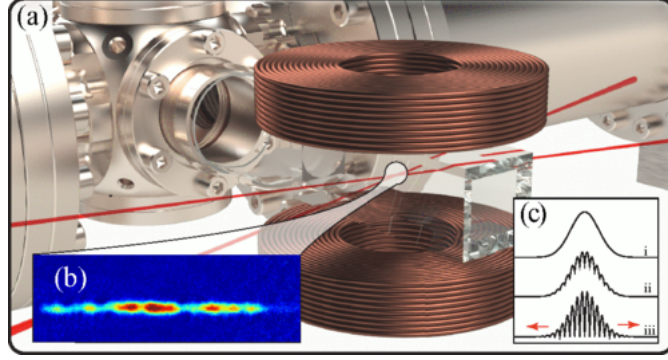


Figura retirada da referência [22].

descrita pela seguinte equação:

$$i \frac{\partial f}{\partial t} = \left[-c_1 \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{c_2}{\sigma^2} |f|^2 + c_3 \left(\sigma^2 + \frac{1}{\sigma^2} \right) \right] f , \quad (1.2)$$

onde c_1 , c_2 , c_3 e c_4 são constantes e $\sigma^2 = (1 + c_4 |f|^2)^{1/2}$.

Seguindo um procedimento padrão de análise da IM, adicionou-se uma pequena perturbação na amplitude da componente $f(z, t)$, que é do tipo onda plana. O ruído superposto é da forma gaussiana e possui amplitude da ordem de 1% da amplitude da onda plana. Os resultados provenientes de uma análise analítica e das simulações numéricas feitas pelos autores assemelham-se sobremodo com a evolução do sistema observada nos experimentos, como pode ser observado na Figura 1.2. Novamente a função de onda evolui para uma formação de componentes espacialmente localizadas que tornam-se distintas e separadas a medida que o tempo decorre e a Instabilidade Modulacional se amplifica. É possível perceber, através da evolução temporal da densidade de probabilidade $|\psi|^2/N$ e da autocorrelação axial $A(z)$, que por volta de 75ms a dinâmica do sistema entra no regime de instabilidade modulacional, surgindo a partir de então vários modos localizados no perfil da densidade de probabilidade do BEC.

Sabe-se portanto que a não-linearidade, enquanto gênese da Instabilidade Modulacional, desempenha um papel preponderante na dinâmica de propagações de ondas.

Figura 1.2: Evolução temporal da densidade de probabilidade normalizada $|\psi|^2/N$ (no topo), da autocorrelação $A(z)$ (no meio) da densidade de um BEC e da largura do pico central da Autocorrelação $A(z)$ (abaixo), simulados numericamente e submetido a uma IM (reproduzido em adequações com as condições e parâmetros experimentais).

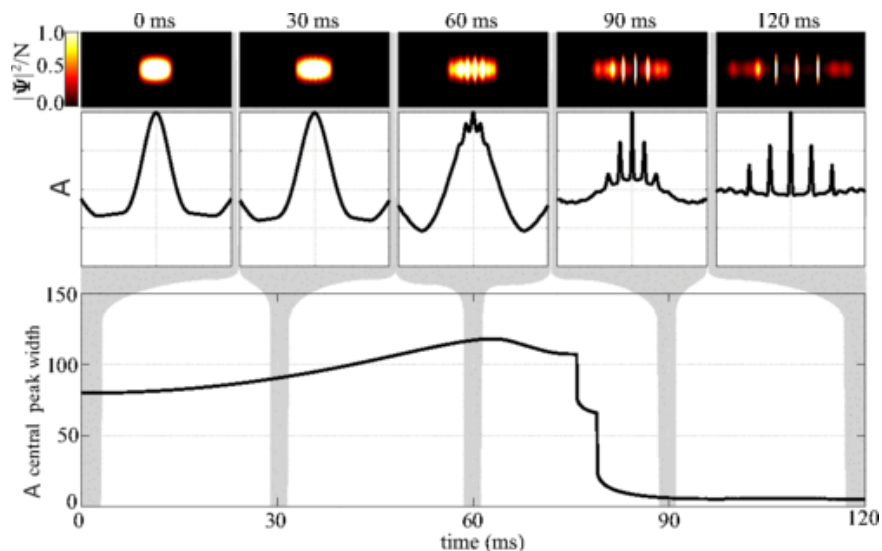


Figura retirada da referência [22].

Muitos dos estudos voltados à temática da IM em ondas propagantes têm sido direcionados também ao contexto de transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade. Nestes sistemas, outros efeitos vêm sendo também explorados, tais como, efeitos de tamanho finito, interações de longo alcance e relaxação não instantânea, em razão de que estes ingredientes podem desempenhar papéis importantes em estruturas como estas [14, 25, 26].

Além de contribuições não lineares na dinâmica de transporte, tem se intensificado também o estudo em interações de longo alcance nestes sistemas físicos. Recentes experimentos com gases bosônicos dipolares presos em redes ópticas, cujas interações dipolo-dipolo decaem com uma lei de potência, têm sido realizados [27, 28]. Esses experimentos têm motivado outros trabalhos no intuito de investigar como um acoplamento de longo alcance influencia nas propriedades críticas de transição para a condensação de Bose-Einstein [29]. Um aparato experimental relativamente recente mostrou a geração de um condensado de Bose-Einstein a partir de um gás de átomos de cromo ^{52}Cr [30], onde cerca de 5×10^5 destes átomos compunham o condensado. Neste caso, os átomos possuíam um momento de dipolo magnético muito intenso, de modo que a interação entre eles fora caracterizada por um acoplamento de longo alcance tipo dipolo-dipolo.

Forças e acoplamentos de longo alcance têm sido usados na descrição de vários fenômenos físicos, com relevantes interesses, como por exemplo em sistemas de interação magnética tipo Ising entre íons[31, 32]. Nestes e outros trabalhos têm-se visto que interações de longo alcance em sistemas unidimensionais simulam muitos efeitos em vários contextos físicos que ocorrem em alta dimensionalidade [29]. É importante destacar também que a localização de Anderson em sistemas de baixa dimensão, com certo grau de desordem, podem sofrer impactos ao considerarmos correlações e interações de longo alcance, influenciando assim na transição metal-isolante [33–36]. No campo das comunicações (redes sociais) as relações de longo alcance podem otimizar substancialmente, sob a perspectiva da propagação de informações, os processos, o tempo e a distância entre as pessoas[37].

Ainda sobre o estudo de sistemas magnéticos também recentemente, foi construído um sistema composto por 16 íons atômicos de ^{171}Yb (Figura 1.3) com *spins* apresentando uma interação antiferromagnética de acoplamento variável [31]. Aprisionando estes íons por meio de armadilhas ópticas, os autores conseguiram observar o ordenamento e a frustração magnética por meio de imagens espacialmente resolvidas. Um campo magnético B muito forte aplicado transversalmente em relação ao acoplamento (tipo *Ising*) entre os *spins* polariza-os, e ao ser diminuída a intensidade deste campo ocorre um ordenamento magnético de acordo com as características interação.

Figura 1.3: Imagem de 16 íons presos com uma distância de $30\mu\text{m}$ entre o primeiro e o último íon.

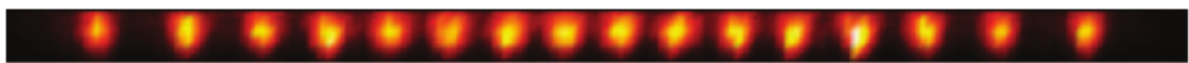


Figura retirada da referência [31].

Aumentando o alcance da interação *Ising* observa-se um crescimento na frustração magnética do sistema, pois ocorre uma supressão da ordem magnética. O controle experimental do acoplamento de interação entre os *spins* é feito por meio de uma força óptica exercida sobre os íons. O modelo teórico deste sistema é constituído por uma cadeia unidimensional de *spins* com interação de longo alcance entre os *spins* representada e controlada pelo termo J_{ij} no Hamiltoniano. Este termo de acoplamento *Ising* J_{ij} entre os *spins* nos sítios i e j decresce com o espaçamento da rede $|i - j|$ segundo uma lei de

potência e é dado por:

$$J_{ij} = \frac{J_0}{|i - j|^\alpha} \quad , \quad \text{com} \quad i \neq j \quad , \quad (1.3)$$

onde J_0 é o fator de acoplamento entre os *spins* e α o expoente que modula o termo interação J_{ij} ao longo da cadeia e neste caso $0 < \alpha < 3$. Dentre muitos resultados dessa investigação, um mostrou que para interações de longo alcance, ou seja α pequeno, o ordenamento magnético dos *spins* foi completamente destruído.

Pela descrição feita acima, percebe-se que tanto a interação de longo alcance entre os elementos de um sistema quanto a instabilidade modulacional são fatores extremamente relevantes na investigação teórica e experimental em vários contextos na Física. Desse modo, neste trabalho pretende-se investigar a IM em um pacote de onda eletrônico numa cadeia de sítios discreta sob condição periódica de contorno. O pacote de onda é inicialmente distribuído uniformemente sobre todos os sítios, onde adicionamos um pequeno ruído à amplitude desta onda inicial, cuja dinâmica é regida pela Equação Não Linear Discreta de Schrödinger (ENLDS). Procuramos compreender a influência de um termo cinético de longo alcance na dinâmica do sistema, caracterizando a transição do estado inicialmente estendido para um estado localizado. Esta transição pode ser identificada por meio do parâmetro crítico de acoplamento da não linearidade χ_{IM} característico da instabilidade modulacional, proveniente da interação entre o pacote de onda e as vibrações da rede. Acima deste valor crítico espera-se que ocorra uma instabilidade e a perturbação cresça fazendo com que o estado do sistema evolua para outros regimes que deverão ser explorados e entendidos adiante. Outros aspectos de interesse são, em primeiro lugar, averiguar que tipo de relação deve existir entre o parâmetro crítico que caracteriza a instabilidade da onda inicial e o tamanho da cadeia, e em segundo lugar, compreender o papel desempenhado pela intensidade do termo cinético na transição entre os regimes da dinâmica do pacote de onda eletrônico. A análise realizada em cada um destes contextos sob investigação deu-se por via integração numérica computacional.

Seguir-se-á o seguinte roteiro no presente trabalho: No Capítulo 2 é apresentado uma discussão sobre os modelos teóricos que fundamentam a resolução dos problemas desenvolvidos nesta tese. Discutiremos a interação elétron-rede segundo as abordagens de Holstein, de Davidov e Su-Schrieffer-Heeger, onde enfatizaremos a primeira. A análise desenvolvida por Holstein resulta em um termo não linear na equação que modela a

dinâmica do sistema, também conhecida como a Equação Não Linear Discreta de Schrödinger (ENLDS). Uma discussão sobre os efeitos da interação de longo alcance em determinados sistemas físicos é realizada, onde destaca-se uma breve análise da relação entre um acoplamento de longo alcance seguindo uma lei de potência numa cadeia discreta e a dimensionalidade efetiva do sistema. Algumas seções são destinadas a uma breve revisão da abordagem teórica da Instabilidade Modulacional no contexto da dinâmica eletrônica numa cadeia discreta de sítios, reproduzindo e discutindo resultados relevantes de um trabalho específico da área [13].

Os resultados inéditos do trabalho são detalhados e discutidos no capítulo 3, no qual estudamos a influência de um termo cinético de longo alcance que decai com a distância entre pontos da cadeia segundo uma lei de potência sobre o parâmetro crítico característico da IM. Por fim, as conclusões e perspectivas do trabalho de pesquisa compõem o capítulo 4 desta tese.

Formalismo e Modelos teóricos

Neste capítulo discutiremos alguns modelos e resultados relacionados à não linearidade em sistemas de baixa dimensionalidade, buscando assim construir uma fundamentação sólida para o nosso trabalho. Desta forma, discutiremos de forma breve alguns modelos que são capazes de descrever a dinâmica eletrônica interagindo com a dinâmica dos sítios da rede (modos vibracionais). Diante de tais modelos, detalharemos com mais cuidado a abordagem apresentada por Holstein, visto que esta descrição foi utilizada como fonte para nosso primeiro modelo. Em seguida apresentaremos alguns sistemas físicos importantes nos quais a interação de longo alcance está presente. Seguimos então com uma discussão sobre a Instabilidade Modulacional, um importante fenômeno presente em vários sistemas físicos não-lineares, e também com a Análise da Estabilidade Linear, método com o qual se estuda a estabilidade de uma solução estacionária. Finalizamos assim com a apresentação de alguns resultados relevantes da literatura referentes a instabilidade modulacional e auto-armadilhamento em redes 1D via análise da estabilidade linear e a ENLDS resolvida numericamente.

2.1 Interação elétron-rede

De maneira geral, a análise física em sistemas de muitos corpos interagentes apresenta grande complexidade. Isso faz com que nestes problemas sempre utilizemos aproximações. De certo que ao considerarmos a interação entre partículas, a modelagem do sistema físico de interesse tende a aproximar-se do contexto real. Em Física da matéria condensada, por exemplo, ao abandonarmos a aproximação estática da rede em um sólido

é imperativo considerarmos a influência das vibrações dos íons sobre a dinâmica de transporte de carga neste sistema.

Ao se perceber a importância desse tipo de influência muitas propostas de modelos surgiram no cenário científico no intuito de investigá-las e conseqüentemente uma interessante fenomenologia foi revelada. Uma fenomenologia presente em alguns destes novos modelos, onde a interação com os modos vibracionais da rede está presente, é o fenômeno de auto-armadilhamento (*self-trapping*). De modo que, esse auto-armadilhamento da função de onda da partícula quântica ocorre quando a intensidade de seu acoplamento com as vibrações internas dos entes da rede ultrapassa um limiar característico [38–43]. Outras descrições comuns é sobre a existência de sólitons e pólarons que em certa medida podem ser tidos como estados aut-armadilhados. No primeiro caso, tratata-se de um perfil de onda num modo concentrado cuja forma permanece incólume, podendo percorrer uma considerável distância, mesmo após colisão com outro sóliton. Este tipo de onda aparece em vários contextos da Física sempre relacionado como solução de equações não lineares regendo a dinâmica de propagação [41, 44]. No segundo, refere-se ao movimento do elétron em um cristal iônico no qual uma deformação na rede causada pela presença deste elétron pode ocorrer na forma de um estado ligado e neste caso há um aumento em sua massa efetiva da partícula.

Dentre as propostas de modelos que surgiram no curso da história, em razão da busca pelo entendimento da interação entre as vibrações dos íons com os portadores de carga, vale destacar os modelos de Davydov (1979), o de Su-Schrieffer-Heeger (modelo SSH - 1979) e a seguir o modelo de Holstein (1959).

A proposta de Davydov foi elaborada com o objetivo de estudar o transporte energético em estruturas moleculares unidimensionais (proteína), onde basicamente uma excitação (éxciton) interna na macromolécula interage com as próprias vibrações da estrutura molecular. O Hamiltoniano usado por Davydov para este sistema é dado por,

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_n \frac{p_n^2}{2M_n} + \frac{1}{4} \sum_n [\kappa_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \kappa_{n-1} (u_n - u_{n-1})^2] + \sum_n \varepsilon_n a_n^\dagger a_n \\
 & + \sum_n (V_{n,n+1} a_n^\dagger a_{n+1} + V_{n,n-1} a_n^\dagger a_{n-1}) + A \sum_n (u_{n+1} - u_{n-1}) a_n^\dagger a_n. \quad (2.1)
 \end{aligned}$$

Onde, do lado direito desta equação, os dois primeiros termos referem-se a energia da rede, o terceiro e quarto termos são relativos a contribuição eletrônica e por último trata-se do termo de acoplamento entre a excitação e as vibrações da rede. Ainda na equação 2.1, o termo de contribuição da rede representam N osciladores harmônicos clássicos acoplados, onde u_n , p_n e M_n são respectivamente o deslocamento, o momento e a massa do n -ésimo elemento da rede. Também temos que κ_n , ε_n , A e V_n representam respectivamente a constante elástica da rede, o potencial periódico *on-site* da rede, o fator de acoplamento com a rede e o termo de *hopping*. Por último, a_n^\dagger e a_n são os operadores criação e aniquilação do éxciton no n -ésimo elemento da rede.

Observamos assim que o Hamiltoniano deste modelo apresenta um termo diagonal que representa o termo de interação entre a dinâmica da excitação (éxciton) e a vibração da rede, ou seja, há duas diferentes equações que regem separadamente suas dinâmicas, porém acopladas. Desta abordagem mostrou-se que esta interação provoca o aprisionamento da excitação, efeito que ficou conhecido na literatura como o sóliton de Davydov [41]. É relevante também ressaltar que neste modelo, a dinâmica eletrônica e a da rede são regidas por equações separadas, porém acopladas. Com relação aos modos vibracionais da rede, há a possibilidade de ser feito dois tratamentos: quântico e clássico. Essas duas descrições serão adequadas dependendo do regime de temperatura que está se considerando [45, 46]. Para o caso de uma delocalização dos sítios da rede descrita por uma distribuição gaussiana, sobrepõem-se efeitos quânticos sobre os térmicos. Se essa distribuição da delocalização torna-se tipo função delta, caracterizando sítios completamente localizados e anulando a incerteza quântica, temos um regime onde as oscilações dos elementos da rede são puramente clássicas. No caso dos osciladores clássico nos sítios da rede, as equações de movimento derivadas para as dinâmicas eletrônica e da rede são, respectivamente:

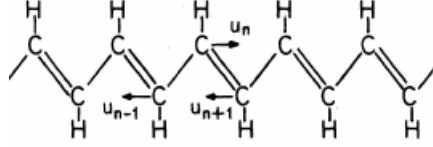
$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = \varepsilon_n \psi_n(t) - \chi (u_{n+1} - u_n) \psi_n(t) + V [\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)] \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial^2 u_n(t)}{\partial t^2} = (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \chi [|\psi_{n+1}(t)|^2 - |\psi_{n-1}(t)|^2], \quad (2.3)$$

aqui temos que χ é o fator de acoplamento com a rede responsável pela transferência de energia entre o éxciton e a rede. Podemos fazer também $\hbar = M_n = 1$, $V_{n,n+1} = V_{n,n-1} = V$ e $\varepsilon_n = 0$.

Na segunda metade do século XX, os cientistas Su-Schrieffer-Heeger (1979) propuseram um modelo (modelo *SSH*) no qual o termo de interação no Hamiltoniano do sistema é inserido através de uma implementação no termo de *hopping*. A motivação dos autores concentrava-se em descrever a formação e propagação do sóliton numa cadeia polimérica de poliacetileno [47, 48] semelhantemente mostrado na Figura 2.1.

Figura 2.1: Parte de uma molécula de *trans*-poliacetileno com cadeia dimerizada.



Fonte: extraído da referência [48].

Neste modelo, a implementação no termo de *hopping* consiste em torná-lo dependente do deslocamento relativo da posição dos elementos da rede nos sítios vizinhos. Importante destacar que as oscilações dos elementos são do tipo harmônica. O Hamiltoniano do sistema físico em questão é dado por:

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2M_n} + \frac{1}{4} \sum_n [\kappa_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \kappa_{n-1} (u_n - u_{n-1})^2] + \sum_n \varepsilon_n a_n^\dagger a_n + \sum_n (V_{n,n+1} a_n^\dagger a_{n+1} + V_{n,n-1} a_n^\dagger a_{n-1}). \quad (2.4)$$

Aqui, o acoplamento elétron-rede surge devido a alteração em $V_{n,n+1}$ escrita na seguinte forma:

$$V_{n,n+1} \approx 1 - \alpha (u_{n+1} - u_n). \quad (2.5)$$

Desta equação observa-se que $V_{n,n+1}$ cresce a medida que os íons se aproximam e decresce no caso contrário, permanecendo unitário ($V_{n,n+1} = 1$) quando está em equilíbrio. Do procedimento teórico adotado na abordagem SSH a evolução temporal do sistema é conduzida pela equação de Schrödinger para o elétron e a equação de Hamilton para a dinâmica da rede dadas respectivamente por:

$$i \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = \varepsilon_n \psi_n(t) - [1 - \alpha (u_{n+1} - u_n)] \psi_{n+1}(t) - [1 - \alpha (u_n - u_{n-1})] \psi_{n-1}(t) \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial^2 u_n(t)}{\partial t^2} = (u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1}) - \alpha [(\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n+1} \psi_n^*) - (\psi_n^* \psi_{n-1} + \psi_n \psi_{n-1}^*)] \quad (2.7)$$

Outro ponto importante deste modelo trata-se de que a relação entre íons ocorre no regime harmônico o qual é suficientemente aceitável para baixas temperaturas, ou seja, a ligação entre eles está sob um regime linear das forças de interação típicos de molas ideais. O êxito obtido nestes trabalhos foi a descrição sobre a formação do sóliton na estrutura macromolecular do polímero, bem como o entendimento do mecanismo de alternância de ligações simples e duplas entre as unidades básicas $(CH)_x$ da molécula.

A abordagem construída por Holstein em relação a interação elétron-rede resultou da análise feita por ele da investigação sobre a propagação de um pólaron num cristal molecular unidimensional [44, 49]. A rede neste sistema é composta por N moléculas diatômicas que possuem um grau de liberdade vibracional interno não acoplado com a molécula vizinha, com o qual o pólaron irá interagir. Diante da importância do modelo para o nosso trabalho, apresentaremos na seção a seguir uma descrição mais detalhada desta abordagem.

2.2 Modelo de Holstein

Uma abordagem muito comum para estudar o acoplamento elétron-rede é a representação da dinâmica eletrônica via equações de evolução discreta no regime quântico. Como veremos adiante, o termo não linear que aparece na equação da dinâmica do sistema é referente à interação elétron-rede. Devido a este tipo de interação interessantes fenômenos podem ocorrer, onde sem dúvida o auto-armadilhamento da função de onda eletrônica é um resultado célebre. Este fenômeno ocorre sempre que o parâmetro que modula a intensidade da interação elétron-rede excede um valor crítico, a partir do qual o pacote de onda do elétron localiza-se em torno de uma posição da cadeia de sítios.

O pioneiro a derivar equações deste tipo, foi Holstein em trabalhos de 1959 [44, 49], no qual ele descreve a dinâmica de um pólaron interagindo com um cristal molecular unidimensional. De modo geral o pólaron surge devido a atração coulombiana entre o elétron e os íons da rede que o encapsulam num poço de potencial de maneira que a evolução do sistema ocorre na forma de um estado ligado. Em cada célula unitária centrada nos sítios da cadeia molecular de seu modelo estava contido uma molécula que era idêntica a todas as outras e oscilavam internamente e independentemente.

Nesta modelagem apresentada por Holstein o cristal molecular diatômico é repre-

sentado por uma rede os graus de liberdade x_n e p_n referente à posição e o momento dos entes presentes no n -ésimo sítio. Neste contexto faremos uso da aproximação adiabática, na qual o elétron desloca-se mais rapidamente comparado com as velocidades das vibrações moleculares no interior de cada célula unitária nos sítios da rede. Em razão deste regime aproximativo a energia cinética da rede pode ser desprezada e as energias potenciais eletrônica e da rede minimizadas, sem perda de generalidade.

O Hamiltoniano total H do sistema, usando a aproximação de ligações fortes (*tight-binding*), apresenta 3 componentes, a saber, a componente da rede H_r , a componente eletrônica H_e e a componente de interação elétron-rede H_i dado por:

$$H = H_r + H_e + H_i \quad (2.8)$$

A componente H_r possui os termos de energia cinética e potencial das partículas que compõem a rede. A parte eletrônica H_e contém a energia cinética e o potencial periódico efetivo que o elétron experimenta, e por conseguinte, a parte de interação H_i é uma função da coordenada do elétron e os deslocamentos x_n de deformação da rede. Devido a interação entre o estado eletrônico e as oscilações da rede ocorre transferência de energia entre ambos e a forma da interação pode ser aproximada para a primeira ordem das deflexões. Em suma, usando o formalismo de segunda quantização podemos escrever as três componentes da seguinte maneira,

$$H_r = \sum_n \left[\frac{\hat{p}_n^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_n^2 \right] \quad (2.9)$$

$$H_e = \sum_n \varepsilon_n a_n^\dagger a_n + \sum_{(n,m)} V_{n,m} a_n^\dagger a_m \quad (2.10)$$

$$H_i = A \sum_n x_n a_n^\dagger a_n \quad (2.11)$$

Usando as equações (2.9), (2.10) e (2.11), a equação (2.8) torna-se,

$$H = \sum_n \left[\frac{\hat{p}_n^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_n^2 \right] + \sum_n \varepsilon_n a_n^\dagger a_n + \sum_{(n,m)} V_{n,m} a_n^\dagger a_m + A \sum_n x_n a_n^\dagger a_n, \quad (2.12)$$

onde \hat{x}_n e \hat{p}_n são os operadores de posição e momento relacionados ao grau vibracional x_n do n -ésimo sítio da rede. Os operadores a_n^\dagger e a_n são, respectivamente, os operadores criação e aniquilação de elétron no n -ésimo sítio, ε_n é o potencial *on-site*, $V_{n,m}$ são os elementos de matriz referentes à integral de transferência eletrônica (*hopping*) através dos sítios, onde consideraremos transferência apenas entre primeiros vizinhos ($n \pm 1$), e por fim, A é o parâmetro de acoplamento elétron-rede. Desse modo, temos em sequência no Hamiltoniano do sistema, a energia cinética e potencial vibracional da rede, o termo potencial periódico *on-site*, o termo cinético de *hopping* eletrônico e o termo de acoplamento elétron-rede.

Um estado do sistema pode ser expresso como uma superposição dos orbitais moleculares, dentro do que denominamos de aproximação *tight-binding*, onde consideramos uma base de estados localizados (orbitais de Wannier) e em razão deste, o vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ pode ser expandido. Dessa forma, obtemos o seguinte:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |\phi_n\rangle \quad (2.13)$$

Na aproximação adiabática podemos ignorar a energia cinética da rede e minimizar as energias potenciais vibracional e eletrônica. Em detrimento de todas essas considerações, o Hamiltoniano total do sistema transforma-se e é escrito dessa forma:

$$H = \sum_m \frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_m^2 + V \sum_n [a_{n+1}^\dagger a_n + a_n^\dagger a_{n+1}] + A \sum_n x_n a_n^\dagger a_n \quad (2.14)$$

Estamos interessados em calcular o valor médio do operador Hamiltoniano, por meio do qual derivaremos a equação de movimento seguindo o formalismo hamiltoniano. Para isto, vamos trabalhar primeiro a expressão:

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_m \left(\frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_m^2 \right) \sum_n \psi_n |\phi_n\rangle + V \sum_n [\psi_{n+1} |\phi_n\rangle + \psi_n |\phi_{n+1}\rangle] \quad (2.15)$$

$$+ Ax_n \sum_n \psi_n |\phi_n\rangle \quad (2.16)$$

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_n \left[\sum_m \left(\frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_m^2 \right) \psi_n + V (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + Ax_n \psi_n \right] |\phi_n\rangle \quad (2.17)$$

Usando o complexo conjugado de Ψ , temos que:

$$\langle \Psi(t) | H | \Psi(t) \rangle = \sum_m \left(\frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_m^2 \right) \left(\sum_{nm} \psi_n^* \psi_m \int \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} \right) \quad (2.18)$$

$$+ V \left(\psi_n^* (\psi_{m+1} + \psi_{m-1}) \int \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} \right) \quad (2.19)$$

$$+ A \left(x_j \psi_n^* \psi_m \int \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} \right) \quad (2.20)$$

Considerando nulas as integrais de overlap,

$$\int \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} = 0 \implies n \neq m \quad (2.21)$$

E assumindo as seguintes condições de normalização,

$$\int \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} = 1 \implies n = m \quad (2.22)$$

$$\int \Psi^* \Psi d\mathbf{r} = 1 \implies \sum_m |\psi_m|^2 = 1 \quad (2.23)$$

Resulta que o valor médio do Hamiltoniano $\tilde{H} = \langle \Psi(t) | H | \Psi(t) \rangle$ torna-se:

$$\tilde{H} = \sum_m \left(\frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_m^2 \right) + V \psi_n^* (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + A x_n |\psi_n|^2 \quad (2.24)$$

Estamos interessados nos valores de x_n que minimizem a energia. Para isto, diferenciamos \tilde{H} em relação a x_p e usando multiplicadores de Lagrange referente à conservação da norma e de posse da equação de Schrödinger independente do tempo ($H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$) obtemos o seguinte resultado:

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A |\psi_p|^2 + \left(E - \sum_m \frac{M\omega^2}{2} \hat{x}_m^2 - \lambda \right) \sum_n \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial x_p} \psi_n + \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial x_p} \right) \quad (2.25)$$

Em decorrência da conservação da norma, o último termo é nulo, pois:

$$\sum_n \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial x_p} \psi_n + \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial x_p} \right) = \sum_n \frac{\partial (\psi_n^* \psi_n)}{\partial x_p} \quad (2.26)$$

$$\sum_n \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial x_p} \psi_n + \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial x_p} \right) = \frac{\partial \left[\sum_n (\psi_n^* \psi_n) \right]}{\partial x_p} \quad (2.27)$$

$$\sum_n \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial x_p} \psi_n + \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial x_p} \right) = 0, \quad (2.28)$$

portanto:

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_p} = M\omega^2 x_p + A |\psi_p|^2 \quad (2.29)$$

Para minimizar \tilde{H} , a derivada do lado esquerdo da equação acima deve ser nula, o que nos leva a:

$$x_p = -\frac{A |\psi_p|^2}{M\omega^2} \quad (2.30)$$

Desse modo a expressão final do Hamiltoniano fica:

$$\tilde{H} = \sum_n \left[-\frac{A^2}{2M\omega^2} |\psi_n|^4 + V\psi_n^* (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \right] \quad (2.31)$$

Agora, para enfim encontrar a equação da dinâmica faremos uso das relações canônicas:

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \psi_n^*} \quad e \quad i \frac{\partial \psi_n^*}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \psi_n} \quad (2.32)$$

Portanto, encontramos assim a Equação Não Linear Discreta de Schrödinger (ENLDS) para primeiros vizinhos:

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = V (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) - \chi |\psi_n|^2 \psi_n, \quad (2.33)$$

onde foi usado $\hbar = 1$, e χ é o parâmetro que modula a não-linearidade, assim escrito:

$$\chi = \frac{A^2}{M\omega^2} \quad (2.34)$$

Posta numa forma mais geral a ENLDS torna-se:

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \sum_m V_{nm} \psi_m - \chi |\psi_n|^2 \psi_n \quad (2.35)$$

Desde de sua primeira demonstração feita por Holstein, a ENLDS têm sido aplicada em vários outros contextos da Física. A dinâmica de propagação com termos não lineares e dispersivos é responsável por uma gama de fenomenologia, tais como o sóliton, *breathers* e instabilidade modulacional (IM), que possui grande viabilidade de aplicação tecnológica [50]. No campo da óptica, a ENLDS tem sido usada na descrição da propagação de pulsos eletromagnéticos em fibras ópticas e guias de ondas acoplados nos quais confirmou-se a previsão teórica da existência de sólitons [51]. Por volta de 1973, Davydov fez um estudo no campo da Bioquímica onde por meio da ENLDS ele investigou o transporte energético de excitações interagindo com modos vibracionais em moléculas de proteína [41].

Outro âmbito em que a equação não linear discreta de Schrödinger têm sido aplicada com bastante êxito é em Condensados de Bose-Einstein (BEC), como consequência disto vários efeitos e fenômenos que ocorrem no contexto óptico (sóliton, *breathers*, IM) têm sido redescoberto também. Todas as previsões teóricas desta abordagem em BEC vêm sendo confirmadas experimentalmente ao longo do desenvolvimento computacional e tecnológico que permitiu a elaboração de aparatos capazes de aprisionar átomos em poços de potenciais resfriando-os a baixas temperaturas [22]. Ainda em Matéria Condensada, é importante mencionar que a ENLDS tem sido de grande valia em estudos de transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade onde a previsão do fenômeno de *self-trapping* (auto-armadilhamento) ganha destaque.

O auto-armadilhamento da função de onda é um dos efeitos mais notáveis relacionado com a presença de um termo não linear na equação discreta de Schrödinger. Um pacote de onda inicialmente localizado estende-se pela rede no regime de não-linearidades fracas, mas torna-se aprisionado em torno de uma posição quando o acoplamento está acima de um valor crítico [42]. Este efeito pode ser entendido também por meio de uma troca energética entre o pacote eletrônico e os modos de vibração dos elementos da rede.

O elétron ao interagir com as oscilações de um íon num dado sítio da rede causa-lhe uma deformação, o íon por sua vez responde esta interação perturbando a onda eletrônica, ou seja, o elétron de forma indireta perturba sua própria função de onda. Desta troca energética pode surgir o aprisionamento do pacote de onda.

Por outro lado, a ENLDS é uma equação sujeita também a instabilidade modulacional (IM) em razão de uma sensibilidade a valores do parâmetro χ e às condições iniciais de contorno, sendo possível resultar tanto em regimes localizados como em regimes de oscilações [16, 52]. Na literatura referente a todos estes sistemas mencionados têm-se visto que a IM aniquila a distribuição uniforme e homogênea da amplitude de uma onda contínua (*continuous wave* - CW) induzindo a dinâmica do sistema a outros regimes de interesse [53, 54].

Em suma, a dinâmica de propagação do pacote de onda apresenta uma fenomenologia rica podendo ocorrer uma pluralidade de fenômenos, como o auto-aprisionamento, quando o processo de relaxação de uma não-linearidade de terceira ordem é considerado, e a Instabilidade Modulacional. Portanto, é de forte interesse, e será objeto de estudo nesse trabalho, uma análise da relação entre os fenômenos de *self-trapping* e instabilidade de ondas contínuas com uma interação de longo alcance por meio da ENLDS. Na seção seguinte uma discussão mais aprofundada sobre uma análise da IM sobre o regime de ondas contínuas superpostas de uma pequena perturbação será feita.

2.3 Interação de longo alcance

Nos concentraremos agora em discutir propriedades e algumas consequências de interações de longo alcance presentes em alguns sistemas físicos. Como já é sabido, estes tipos de interações podem alterar significativamente a dinâmica de sistemas relacionados com o fenômeno de transporte. Vários mecanismos dependem fortemente dessas interações [36, 37, 55–59], em particular discutiremos brevemente nesta seção a relação entre um acoplamento de uma lei de potência no *hopping* numa cadeia de um gás de bósons e a dimensionalidade efetiva do sistema [29].

2.3.1 Interação com decaimento tipo lei de potência

A presença de interações de longo alcance podem influenciar profundamente aspectos relevantes da dinâmica de um sistema físico. De forma simplória podemos entender um sistema com interação de longo alcance, tal que, um componente arbitrário deste sistema possa se comunicar (interagir) com outra parte qualquer que seja sua localização. Em geral, a magnitude deste tipo de interação decresce com a distância entre dois componentes em pontos específicos do sistema físico considerado. Os exemplos clássicos de sistemas com este tipo de interação são os casos dos potenciais *Coulombiano* e *Gravitacional Newtoniano*, onde a intensidade da interação obedece uma lei de potência. Um modelo de potencial de longo alcance genérico seguindo uma lei de potência pode ser escrito na seguinte forma geral:

$$V(r) \approx \frac{1}{r^\alpha} , \quad (2.36)$$

onde r é a distância e α o expoente que modula a magnitude da interação, que no caso das interações entre partículas carregadas ou massas temos que $\alpha = -1$, de modo que a equação 2.36 toma a forma:

$$V(r) \approx \frac{1}{r^{-1}} . \quad (2.37)$$

Por outro lado, caso um dado componente do sistema esteja restrito à comunicar-se apenas com outras partes em suas vizinhanças imediatamente próximas a interação é dita de *curto alcance*, na qual destaca-se sobremaneira a conhecida interação de primeiros vizinhos.

Recentemente um conjunto seletivo de sistemas físicos que se enquadram nesta abordagem, como por exemplo, os plamas carregados, condensados de Bose-Einstein (BEC), sistemas auto-gravitantes, modelos de Hamiltoniano de campo médio, átomos de Rydberg, têm despertado interesse da comunidade acadêmica [29, 60–63]. Especificamente com relação a condensação de Bose-Einstein, no artigo [29] foi investigado as propriedades de transição da condensação de um gás de bósons ideal disposto numa cadeia unidimensional com termo de acoplamento de longo alcance no *hopping* decaindo com uma lei de potência. O Hamiltoniano deste sistema escrito na representação dos orbitais atômicos de Wannier $\{|n\rangle\}$ é dado por:

$$H = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| - \sum_{n \neq m} \nu_{n,m} |n\rangle \langle m|, \quad (2.38)$$

onde ε_n é a energia no sítio n que neste caso foi considerado $\varepsilon_n=0$. O termo $\nu_{n,m}$ é a amplitude de *hopping* entre os sítios n e m do tipo:

$$\nu_{n,m} = \frac{\nu}{r^\alpha} = \frac{\nu}{|n-m|^\alpha}, \quad (2.39)$$

com:

$$r = |n - m|. \quad (2.40)$$

Considerando os autoestados do Hamiltoniano soluções harmônicas do tipo Bloch ($|\phi_k\rangle \propto e^{ikn}|n\rangle$) os autores mostraram que a densidade de estados (DOS) apresenta comportamentos distintos para diversos valores do expoente α de acoplamento do *hopping*. Neste trabalho foi demonstrado que a dimensionalidade do sistema é de suma importância para que haja a condensação, pois para baixas dimensões ($d \leq 2$) e com acoplamento de curto alcance não deve ocorrer a transição BEC, com raras exceções como em cadeias desordenadas [64–66]. Por outro lado, para $2 < d < 4$ o comportamento crítico do sistema mostrou uma intensa dependência com a dimensionalidade da rede. Foi possível perceber portanto, que o acoplamento de longo alcance pode induzir a transição ou até mesmo extingui-la num sistema de baixa dimensão topológica, pois visto que o expoente α da amplitude de *hopping* pode levar o sistema a uma dimensionalidade efetiva diferente [67].

Considerando uma partícula quântica movendo-se em um potencial periódico sob influência de uma não linearidade de terceira ordem e a amplitudes de *hopping* de longo alcance podemos fazer uma análise da dimensionalidade efetiva também. Dentro de uma descrição de ligação forte (aproximação *tight-binding*), o estado quântico da partícula no tempo t pode ser decomposto na base composta pelos orbitais de *Wannier* localizados como discutido em seções anteriores. Desse modo, a evolução temporal das amplitudes do pacote de onda são governadas pela equação discreta não linear de Schrödinger

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \sum_m V_{nm} \psi_m - \chi |\psi_n|^2 \psi_n. \quad (2.41)$$

onde χ é o parâmetro de acoplamento efetivo elétron-rede e V_{nm} é a amplitude do salto eletrônico entre os sítios n e m . Neste caso, consideraremos que essas amplitudes de salto decaem como uma lei de potência da distância r entre os sítios n e m , de modo que $V_{nm} = V/r^\alpha$, com α sendo o expoente que rege o alcance efetivo do acoplamento de longo alcance. Condições de contorno periódicas são assumidas para uma cadeia com N sítios.

O potencial *on-site* é considerado nulo sem qualquer perda de generalidade. Desse modo, na ausência de não linearidade, os estados estacionários são semelhantes aos estados de *Bloch*, em cuja representação a relação de dispersão pode ser escrita da seguinte maneira citereferência:

$$E_k = 2V \sum_{r=1}^{N/2} \frac{\cos(kr)}{r^\alpha} \quad (2.42)$$

com k sendo o vetor de onda dado por $k = 2\pi(j-1)/N$ ($j = 1, 2, 3, \dots, N$). A densidade de estados é encontrada usando:

$$g(E) = \left[2\pi \left| \frac{dE}{dk} \right| \right]^{-1} \quad (2.43)$$

neste caso, o espectro da densidade de estados torna-se não conciso (ilimitado) para $\alpha \leq 1$ e não será explorado este regime. Assim, para $\alpha \geq 3$ a densidade de estados nas proximidades do estado fundamental comporta-se como $g(E) \propto |E - E_0|^{-1/2}$, onde E_0 é a energia do estado fundamental, comportamento este típico de cadeias com amplitude de *hopping* de curto alcance. Por outro lado, para $\alpha < 3$ a densidade torna-se $g(E) \propto |E - E_0|^{(2-\alpha)/(\alpha-1)}$. Uma dimensionalidade efetiva d_{ef} pode ser associada à densidade $g(E)$ como na referência [29], de modo que pode ser expressa na forma:

$$d_{ef} = \frac{2}{\alpha - 1}. \quad (2.44)$$

A seguir, estenderemos nossa discussão à consideração de resultados pertinentes ao estudo da instabilidade modulacional que também fundamenta este trabalho. Estaremos portanto, analisando em que contexto e aproximações se adequa o sistema investigado para compreender a abrangência de seus respectivos resultados.

2.4 Instabilidade Modulacional e a ENLDS

Um dos principais fenômenos intrínsecos à propagação de ondas em meios não lineares é o da Instabilidade Modulacional. Este efeito trata da quebra de uma onda contínua em razão de um crescimento exponencial de pequenas perturbações adicionadas na amplitude desses estados estacionários. Sua observação tem se dado nas mais diversas áreas

como em Física de Plasma [68, 69], condensados de Bose-Einstein (BECs) [70, 71], e em sistemas magnéticos [72, 73], de modo que tem se tornado um tema muito relevante em pesquisas atuais, pois mostra-se promissor em suas potencialidades no que se refere a aplicações tecnológicas [2, 74, 75].

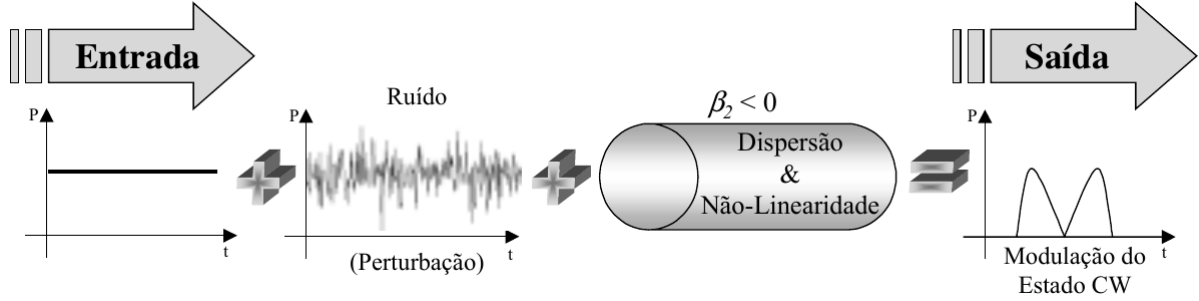
A investigação referente ao fenômeno da IM é feito por meio da análise da estabilidade linear das soluções estacionárias do sistema dinâmico não linear que geralmente admite-se soluções estacionárias do tipo onda contínua (CW). O procedimento consiste em adicionar uma pequena perturbação no estado estacionário do sistema e derivar a equação de movimento que rege a dinâmica deste ruído. Segue-se então com o processo de linearização das equações que regem o sistema em razão de que esta perturbação é bem menor comparada à amplitude da onda contínua. A estabilidade do estado estacionário do sistema é aferida a partir do espectro das frequências possíveis para a onda perturbada. Este espectro de frequências possíveis é elucidado através do cálculo de uma relação de dispersão que permitirá compreender para quais valores de frequência teremos regiões de estabilidade ou de instabilidade.

A propagação de pulsos eletromagnéticos em fibras ópticas, com contribuições não lineares e dispersivas no meio, tem sido um campo exaustivamente investigado, mas ainda muito fértil com relação ao fenômeno da instabilidade modulacional. Neste contexto, a dispersão no regime anômalo do meio causa o alargamento temporal do pulso, pois as diferentes frequências sofrem diferentes atrasos. Já o efeito da não-linearidade, muitas vezes do tipo Kerr relativo à uma susceptibilidade de terceira ordem no meio, tende a comprimir o pulso. Estabelece-se então uma competição entre a dispersão anômala e a não linearidade, de modo que um pequeno ruído cresce exponencialmente até atingir uma saturação no sistema. Ao atingir o equilíbrio na competição entre estes dois fenômenos o pulso de onda contínua quebra-se em pulsos ultra curtos, o que demonstra uma íntima relação entre a IM e a geração de sólitons ópticos [76, 77].

A Figura 2.2 mostra um diagrama ilustrando o processo da instabilidade modulacional numa fibra óptica, no qual o sinal de entrada é a superposição de uma onda contínua e um ruído com amplitude muito pequena propagando-se num meio com não linearidade e dispersão anômala que resulta na modulação do estado CW.

Como efeito ilustrativo e comparativo visando uma melhor compreensão desse processo iremos analisar rapidamente um caso típico de instabilidade modulacional em

Figura 2.2: Processo e elementos da instabilidade modulacional numa fibra óptica com não linearidade tipo Kerr no regime de dispersão anômala.



Fonte: retirada da referência [78]

Óptica não linear. Neste caso, por meio das equações de Maxwell do eletromagnetismo para um meio dielétrico sabe-se que equação que governa dinâmica de propagação numa direção z de pulsos de radiação ultracurtos com amplitude $E(z, t)$ dentro de uma fibra óptica com dispersão e não linearidade, sem perdas por absorção, é a Equação Não Linear de Schrödinger (ENLS) [76] dada por:

$$i \frac{\partial E(z, t)}{\partial z} = \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 E(z, t)}{\partial T^2} - \gamma |E(z, t)|^2 E(z, t) \quad (2.45)$$

Esta equação é também conhecida com Equação de Shcrödinger em um sóliton, onde β_2 e γ são parâmetros de dispersão cromática e não linearidade do meio respectivamente. O regime de dispersão anômala ($\beta_2 < 0$) ocorre quando as componentes do campo $E(z, t)$ com fequências mais baixas propagam-se com velocidade maior que as demais componentes. Um trabalho bastante conhecido foi desenvolvido por Hasegawa (1973) [76] neste contexto. No caso estacionário temos que:

$$\frac{\partial E(z, t)}{\partial t} = 0. \quad (2.46)$$

Portanto a equação 2.45 torna-se:

$$\frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 E(z, t)}{\partial T^2} - \gamma |E(z, t)|^2 E(z, t) = 0. \quad (2.47)$$

Cuja solução é do tipo:

$$E(z) = E_0 e^{i\gamma|E_0|^2 z} , \quad (2.48)$$

onde E_0 e $|E_0|^2$ são respectivamente a amplitude e a potência incidente da radiação.

Para o estudo da estabilidade da solução estacionária adiciona-se uma pequena perturbação $\xi(z, t)$ na amplitude da onda, de modo que obtemos da equação 2.46 o seguinte:

$$E(z, t) = [E_0 + \xi(z, t)] e^{i\gamma|E_0|^2 z} , \quad (2.49)$$

considerando $\xi(z, t) \ll E_0$.

A substituir a equação 2.49 na 2.45 e após algum algebrismo obtemos a equação que governa a dinâmica do ruído $\xi(z, t)$ escrita como:

$$i \frac{\partial \xi(z, t)}{\partial z} = \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 \xi(z, t)}{\partial T^2} - \gamma |E_0|^2 [\xi(z, t) + \xi^*(z, t)] \quad (2.50)$$

sendo $\xi^*(z, t)$ o complexo conjugado de $\xi(z, t)$. Por meio da transformada de *Fourrier* a equação 2.50 pode ser solucionada no espaço das frequências:

$$\xi(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi(k, \omega) e^{-i(kz - \omega t)} dk d\omega . \quad (2.51)$$

Efetuada a aplicação desta transformada de *Fourrier* na equação 2.50 obtém-se a seguinte relação de dispersão:

$$k = \left\{ \frac{\beta_2 \omega^2}{4} \left[\omega^2 + \frac{4\gamma|E_0|^2}{\beta_2} \right] \right\}^{1/2} , \quad (2.52)$$

aqui k e ω são o vetor de onda e a frequência da solução harmônica da perturbação respectivamente.

Da relação de dispersão dada pela equação 2.52 vemos que no regime de dispersão normal onde $\beta_2 > 0$ o vetor de onda k é um número real, portanto a perturbação continua sendo uma solução do tipo exponencial imaginária (harmônica) e o sistema permanece estável no estado estacionário. Por outro lado, no regime de dispersão anômala ($\beta_2 < 0$) o vetor de onda k torna-se imaginário sempre que:

$$\omega^2 > \frac{4\gamma|E_0|^2}{\beta_2}, \quad (2.53)$$

Esta condição constitui-se uma região de instabilidade do sistema, pois $\xi(z, t)$ passa a crescer na forma exponencial dentro da fibra. Quando se leva em conta efeitos de retardo no termo da não linearidade e saturação a relação de dispersão é modificada de modo que pode induzir o sistema à instabilidade modulacional mesmo em regime dispersão normal [79, 80]. Na sequência será feita uma análise semelhante, no entanto aplicado à dinâmica eletrônica.

2.4.1 Análise da Estabilidade na dinâmica eletrônica

Como visto antecipadamente, o método de análise da estabilidade linear consiste em um processo de linearização da equação de movimento de perturbações em ondas contínuas de sistemas não lineares, onde objetiva-se entender o comportamento deste sistema próximo ao seu estado de equilíbrio. Para isto deve-se adicionar uma pequena perturbação na solução estacionária acompanhando sua dinâmica, caso ela cresça teremos um regime instável, do contrário a solução se aproximará do estado de equilíbrio, permanecendo estável.

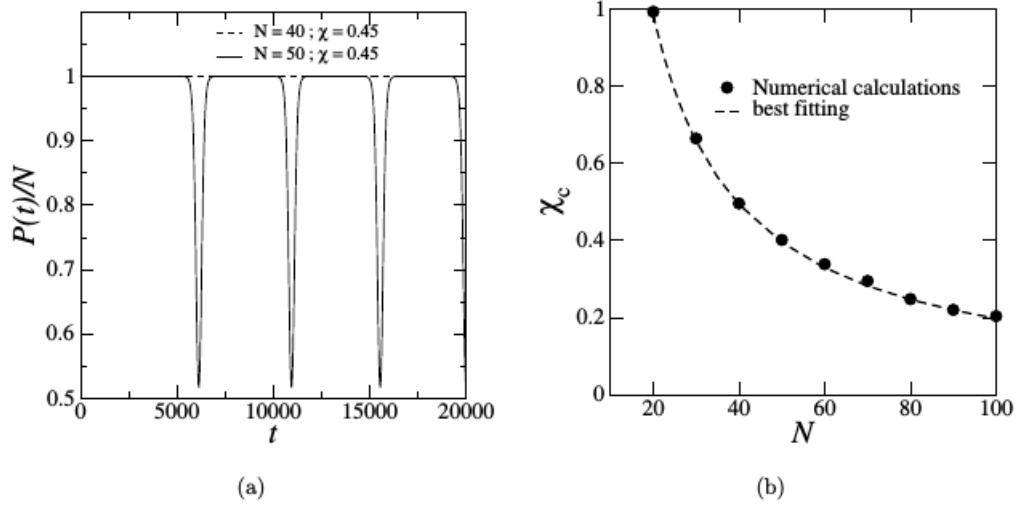
A influência da não linearidade sobre estados eletrônicos uniformes em redes discretas tem sido alvo de investigação recente. Na referência [81] foi feito um estudo da estabilidade de um pacote de onda estacionário em rede discreta unidimensional e em fulereno com diversos tamanhos (C_{60} e C_{180}). Para cadeias com condição periódica de contorno o pacote de onda foi distribuído uniformemente sobre todos os sítios. A dinâmica desse sistemas é descrita pelo modelo de Holstein (ver seção anterior) da equação de Schrödinger não linear 2.33 é dada por:

$$i \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = V [\psi_{n-1}(t) + \psi_{n+1}(t)] - \chi |\psi_n(t)|^2 \psi_n(t), \quad (2.54)$$

com o parâmetro de acoplamento efetivo elétron-rede dado por $\chi = \frac{A^2}{M\omega^2}$ e o termo de *hopping* de primeiros vizinhos sendo $V = 1$.

Neste trabalho, por via numérica computacional, os autores calcularam o número de participação normalizado $P(t)/N$, que fornece uma medida do número de sítios que estão

Figura 2.3: (a) Número de participação normalizado em função do tempo para uma cadeias com 40 e 50 sítios para $\chi = 0.45$. (b) Estimativa numérica de χ_c que separa os regimes estável e instável em função do tamanho das cadeias.



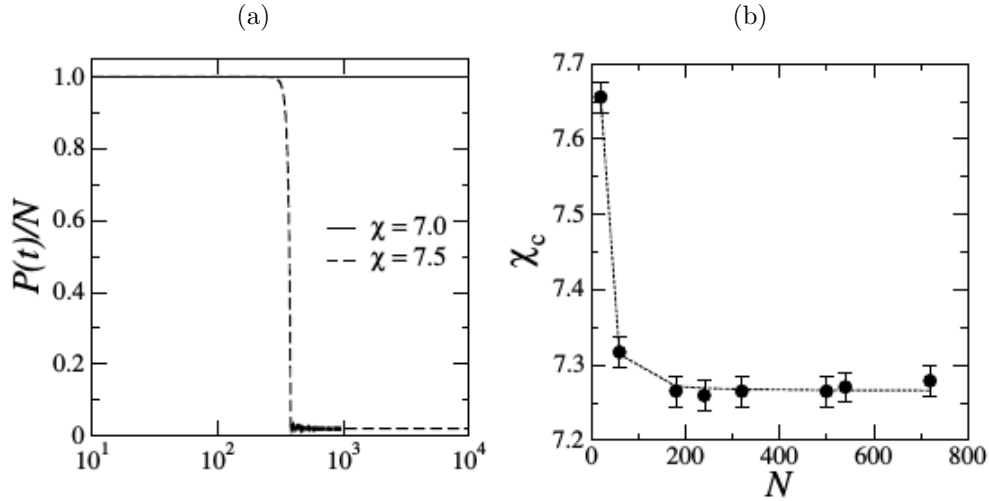
Imagens retiradas da referência [81].

sendo visitados num dado instante da evolução do sistema, onde $P(t)/N = 1$ caracteriza um estado estendido e $P(t)/N \ll 1$ trata-se de um estado localizado. Com isso, foi observado numa cadeia com $N = 50$ sítios e para $\chi = 0.3$ o número de participação permanece constante para qualquer tempo evidenciando que para este valor da constante de acoplamento efetivo elétron-rede o estado eletrônico permanece estendido e estável. No entanto para $\chi = 0.6$ o pacote de onda evolui para uma dinâmica de oscilações do número de participação indicando um regime de instabilidade.

Para tamanhos de cadeias diferentes o valor crítico χ_c acima do qual ocorre a transição estável-instável é afetado. Para cadeias com 40 e 50 sítios o número de participação para o mesmo valor $\chi = 0.45$ ocorre dinâmicas distintas (ver figura 2.3). Para $N = 40$ o pacote de onda permanece estável e para $N = 50$ ele exibe uma padrão oscilante. A dependência da não linearidade crítica com o tamanho da cadeia foi estimado numericamente como se ver na Figura 2.3. O parâmetro crítico χ_{IM} descrece proporcionalmente com o inverso de N .

A análise deste estudo sobre a estabilidade de um pacote de onda uniforme estendeu-se também para redes com topologias onde os sítios formam uma superfície fechada tipo fulerenos (*bulkballs*). Considerando uma estrutura C_{60} e um pacote de onda inicialmente estendido sobre todos os sítios da rede, ficou demonstrado que para $\chi = 7.0$

Figura 2.4: (a) Número de participação normalizado em função do tempo de uma topologia tipo fulereno C_{60} para $\chi = 7.0$ e $\chi = 7.5$. O resultado mostra que em $\chi = 7.0$ o pacote de onda permanece estável e em $\chi = 7.5$ o pacote localiza em torno de uma fração de sítios da estrutura. (b) Estimativa numérica de χ_c que separa os regimes estável e instável em função do número de sítios nas estruturas de fulerenos (*bulkballs*).



Imagens retiradas da referência [81].

o número de participação continua uniforme e a transição para o regime de focalização ocorre em torno de $\chi_c = 7.32$. Porém, nenhum padrão oscilante na participação foi detectado acima deste valor crítico como fora observado em cadeias. Neste caso observou-se que a transição entre o estado uniforme estendido para o fortemente localizado acontece de forma direta (Figura 2.4a). A relação entre o acoplamento efetivo crítico χ_c e o número de sítios N nestas estruturas foi também mapeada (Figura 2.4b). De modo que para fulerenos com estruturas pequenas o parâmetro decresce com N numa estreita faixa de tamanhos, porém satura num valor finito para estruturas maiores do em torno de 180 sítios diferente do contínuo decrescimento encontrado nas redes discretas unidimensionais.

Em resumo, da investigação realizada referente a estabilidade do pacote de onda uniforme em redes discretas unidimensionais e fulerenos (*bulkballs*) observou-se uma diferença significativa no diagrama de fases de χ_{IM} versus N para cada uma dessas topologias. No caso das cadeias, o parâmetro crítico χ_{IM} que separa as fases de estabilidade e instabilidade decresce linearmente com o tamanho da cadeia desenvolvendo uma dinâmica com padrão tipo *breathers* logo acima do valor crítico χ_{IM} . Por outro lado, nas estruturas tipo *bulkballs* o limiar crítico χ_{IM} mostrou uma fraca dependência com o número de sítios

da rede e não apresentando mais oscilações na função participação logo acima da região de estabilidade.

Além do estudo numérico da estabilidade de uma onda uniforme, é possível também um tratamento analítico. Este tipo de procedimento é recorrente em outros contextos como em óptica não linear, por exemplo. A ideia central concentra-se na análise da dinâmica do pacote de onda próximo ao estado estacionário uniforme como será demonstrado a seguir. Para iniciarmos esta análise vamos escrever a ENLDS em sua versão contínua. Para isto, vamos expandir ψ_{n+1} e ψ_{n-1} em série de Taylor:

$$\psi_{n+1} = \psi_n + \Delta x \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \dots \quad (2.55)$$

$$\psi_{n-1} = \psi_n - \Delta x \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} + \dots \quad (2.56)$$

As amplitudes de primeiros vizinhos, ψ_{n+1} e ψ_{n-1} , estão escritas em termos da amplitude ψ_n centrada no sítio n acrescidas de termos de correção até segunda ordem. Ao substituírmos as equações (2.55) e (2.56) na equação 2.54 e adotando $\Delta x^2 = V = 1$, obtemos uma versão contínua da equação não linear discreta de Schrödinger:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \psi - \chi |\psi|^2 \psi \quad (2.57)$$

A solução de interesse do estudo é um estado eletrônico distribuído espacialmente de maneira uniforme e que satisfaça a seguinte condição:

$$\nabla^2 \psi = 0 \quad , \quad (2.58)$$

logo a equação 2.57 transforma-se em:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\chi |\psi|^2 \psi \quad (2.59)$$

cuja solução é do tipo onda contínua (CW):

$$\psi(t) = \psi_0 e^{i\chi|\psi_0|^2 t} \quad (2.60)$$

Adicionamos uma pequena perturbação $\varepsilon(x, t)$ na amplitude ψ_0 , onde $\varepsilon \ll \psi_0$, afim de estudarmos a estabilidade da solução estacionária $\psi(x)$, obtemos:

$$\psi(x, t) = [\psi_0 + \varepsilon(x, t)] e^{i\chi|\psi_0|^2 t} \quad (2.61)$$

O próximo passo é linearizar a equação da dinâmica com relação à $\varepsilon(x, t)$. Tomando apenas os termos lineares em $\varepsilon(x, t)$ e desprezando os termos de ordem superior, obtemos:

$$i \frac{\partial \varepsilon(x, t)}{\partial t} = \nabla^2 \varepsilon(x, t) - \chi |\psi_0|^2 [\varepsilon(x, t) + \varepsilon^*(x, t)] , \quad (2.62)$$

sendo $\varepsilon^*(x, t)$ o complexo conjugado de $\varepsilon(x, t)$. Assim, equação linearizada possui solução harmônica escrita na forma:

$$\varepsilon(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx - \omega t)} \quad (2.63)$$

A compreensão da dinâmica de $\varepsilon(x, t)$ é obtida através da relação de dispersão e sua dependência com o vetor de onda κ , a frequência ω e o parâmetro de acoplamento efetivo χ . Para isto, inserimos esta solução harmônica 2.63 na equação 2.62. Obtemos então um sistema de duas equações homogêneas:

$$(\omega - \kappa^2 + \chi |\psi_0|^2) A + (\chi |\psi_0|^2) B = 0 \quad (2.64)$$

$$(-\chi |\psi_0|^2) A + (\omega + \kappa^2 - \chi |\psi_0|^2) B = 0 \quad (2.65)$$

Para que esse sistema de equações possua solução não trivial ($A = 0$ e $B = 0$ é solução, mas não tem significado físico), seu determinante principal deve ser igual a zero, desse modo na forma matricial podemos escrever:

$$\begin{pmatrix} \omega - \kappa^2 + \chi |\psi_0|^2 & \chi |\psi_0|^2 \\ -\chi |\psi_0|^2 & \omega + \kappa^2 - \chi |\psi_0|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 , \quad (2.66)$$

onde o determinante é dado por:

$$\begin{vmatrix} \omega - \kappa^2 + \chi |\psi_0|^2 & \chi |\psi_0|^2 \\ -\chi |\psi_0|^2 & \omega + \kappa^2 - \chi |\psi_0|^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (2.67)$$

o que, depois de pequeno um esforço algébrico, nos leva à relação de dispersão:

$$\omega = \sqrt{\kappa^2 (\kappa^2 - 2 \chi |\psi_0|^2)}, \quad (2.68)$$

onde definindo:

$$\kappa_{IM} = \sqrt{2 \chi |\psi_0|^2}, \quad (2.69)$$

e usando a condição de normalização na equação 2.60 encontramos que a amplitude da onda uniforme é $\psi_0 = 1/\sqrt{N}$, logo:

$$\kappa_{IM} = \sqrt{2 \chi_{IM} / N}, \quad (2.70)$$

podemos reescrever a relação de dispersão:

$$\omega = \sqrt{\kappa^2 (\kappa^2 - \kappa_{IM}^2)}; . \quad (2.71)$$

Deste resultado vemos que para grandes vetores de onda (comprimento de onda pequeno) a frequência ω é real, o que torna a solução $\varepsilon(x, t)$ do tipo exponencial com expoente imaginário (harmônica) e portanto estável. De outra maneira, para vetores de onda pequenos (grandes comprimentos de onda) ω é imaginário fazendo com que a perturbação $\varepsilon(x, t)$ cresça exponencialmente neste regime atingindo a instabilidade. Um estudo recente da instabilidade modulacional (IM) na dinâmica eletrônica [13] mostrou que o vetor de onda característico que separa estes dois regimes é dado por:

$$\kappa_{IM} = \sqrt{\frac{2\chi_{IM}}{N}} \quad (2.72)$$

Tal expressão pode ser analisada em termos do parâmetro χ_{IM} característico acima do qual o pacote de onda deixa de ser uniformemente estável e adentra ao regime de instabilidade, onde as perturbações crescem exponencialmente. Devido a condição periódica de contorno sabemos que os valores permitidos para o vetor de onda é:

$$\frac{2\pi}{L} < \kappa < \frac{2\pi}{a} , \quad (2.73)$$

onde L é o tamanho lateral da rede e a o espaçamento entre sítios. Para que haja alguma banda de instabilidade o vetor de onda crítico deve ser considerado no limite do valor mínimo permitido:

$$\kappa_{IM} = \frac{2\pi}{L} \quad (2.74)$$

e portanto:

$$\chi_{IM} = \frac{2\pi^2 N}{L^2} , \quad (2.75)$$

onde N é o número de sítios da rede e L o tamanho lateral da cadeia. Observamos deste resultado que o parâmetro crítico característico da instabilidade modulacional exibe uma forte dependência com a topologia espacial dos sistema. Para o caso bidimensional de uma rede quadrada (2D) onde $N = L^2$, o parâmetro χ_{IM} independe do tamanho da cadeia. Por outro lado, no caso unidimensional, para o qual $N = L$, o parâmetro de acoplamento efetivo crítico χ_{IM} exibe uma dependência com o inverso do comprimento L da cadeia. Em resumo, temos que:

$$\chi_{IM} = 2\pi^2 \implies N = L^2 \text{ (rede quadrada)} \quad (2.76)$$

$$\chi_{IM} = \frac{2\pi^2}{L} \implies N = L \text{ (rede 1D)} \quad (2.77)$$

O procedimento supracitado nos dá uma boa fundamentação para análise da instabilidade modulacional em cadeias discretas. Para uma compreensão mais apurada, apresentaremos a seguir uma análise numérica da instabilidade modulacional de um estado eletrônico estacionário em redes discretas unidimensionais.

2.4.2 Instabilidade modulacional e auto-armadilhamento

Um estudo detalhado sobre IM de soluções estacionárias em redes discretas unidimensionais modeladas pela ENLDS foi realizado por Chaves *et al* (2015) [13]. O procedimento analítico adotado pelos autores foi o mesmo discutido na seção anterior, e os resultados numéricos evidenciaram uma importante fenomenologia nestes sistemas. Em razão de uma melhor compreensão e também como teste de validação do nosso código computacional, revisitamos o problema e resolvemos numericamente a equação 2.54, que modela a dinâmica da função de onda eletrônica numa cadeia com N sítios, nos quais localizam-se os íons que apresentam um grau de liberdade vibracional interno como descrito no modelo de Holslein. Nesta cadeia vamos considerar uma condição periódica de contorno. A função de onda inicial do sistema é composta por uma onda uniforme, cuja amplitude é dada por $\psi_0 = 1/\sqrt{N}$, superposta de um pequeno ruído, com amplitudes dentro do intervalo $[0, 10^{-3}\psi_0]$, distribuído aleatoriamente sobre todos os N sítios da cadeia. A resolução numérica do conjunto de equações discretas foi feita através do método de Runge-Kutta de oitava ordem no qual usamos uma discretização no tempo de 10^{-2} permitindo uma excelente precisão na norma da função de onda durante toda a integração de modo que $\left[1 - \sum_n |\psi_n|^2\right] \leq 10^{-12}$.

Para avaliar a distribuição espacial do pacote de onda durante toda a evolução temporal do sistema, uma quantidade muito importante pode ser usada para este fim, a qual denominamos de função participação dada por,

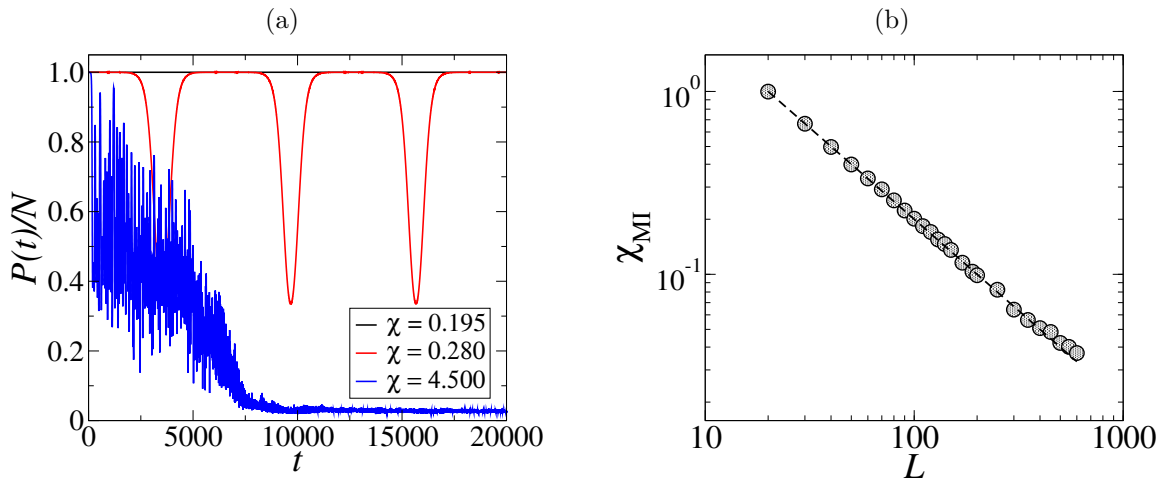
$$P(t) = \left[\sum_{n=1}^N |\psi_n(t)|^4 \right]^{-1} \quad (2.78)$$

A função participação $P(t)$ fornece uma medida relativa a fração dos sítios da rede que o pacote está visitando num dado instante de tempo t . Para uma onda estendida uniformemente ao longo da cadeia a função participação $P(t)$ é igual ao número de sítios da própria cadeia, enquanto que torna-se unitária para o caso de o pacote de onda localizado integralmente num dado sítio.

Como visto na seção 2.4.1, da equação 2.77, para cadeias discretas resulta que o valor crítico χ_{IM} escala linearmente com o inverso do tamanho da cadeia, já para redes quadradas χ_{IM} permanece constante independentemente do tamanho da rede. Analiticamente, a partir da expressão 2.77, considerando uma cadeia com $L = 100$ sítios temos que

$\chi_{IM} \approx 0.197$. Da análise numérica como pode ser visto na Figura 2.5a para valor ligeiramente menor deste limiar mostra que o pacote de onda permanece estendido. Todavia, ao tomarmos valores um pouco acima desde valor crítico a função participação adentra em um regime de oscilações periódicas (*breathers*). Ao realizarmos simulações com valores do parâmetro de acoplamento maiores que o limiar de ocorrência do *self-trapping* $\chi_{ST} \approx 4.0$ a função de onda evolui para um regime de aprisionamento como já previsto na literatura, mas antes de atingir esse estado fortemente localizado a onda passa por um intervalo transitório realizando um comportamento bastante irregular. Portanto, a resolução numérica realizada neste trabalho concordou de maneira satisfatória com a estimativa analítica prevista na equação 2.77 assim como também com os resultados obtidos por Chaves, *et al* (2015) [13].

Figura 2.5: (a) Evolução temporal do número de participação normalizado numa cadeia 1D de 100 sítios exibindo os regimes estendido ($\chi = 0.195$), *breathers* ($\chi = 0.280$) e aprisionado ($\chi = 4.500$) da função de onda. (b) Estimativa numérica do parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{MI} versus tamanho da cadeia. A linha tracejada refere-se a estimativa analítica prevista na equação 2.77.



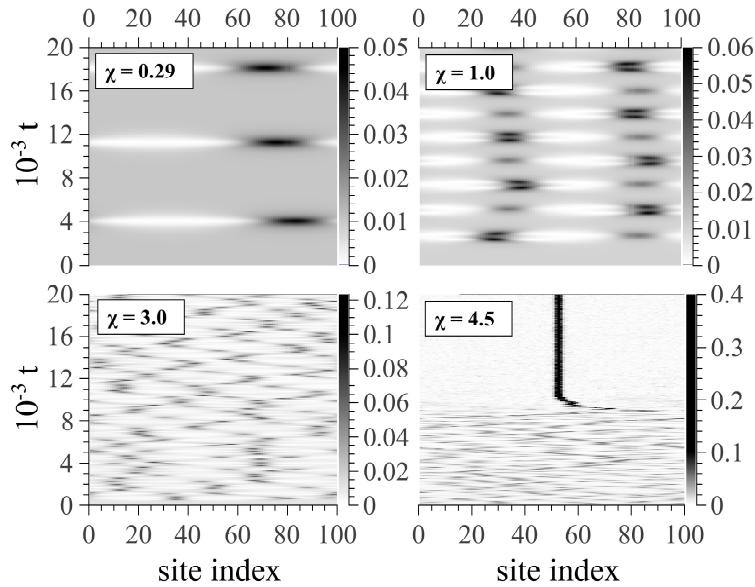
Fonte: Chaves, *et al* (2015)[13].

Embora a estimativa contida na equação 2.77 tenha sido obtida pela análise da estabilidade linear no regime contínuo, os autores mostraram que esta concorda satisfatoriamente com os resultados numéricos no caso discreto para cadeias pequenas como mostra a figura 2.5b. Neste caso foi mapeado o parâmetro de acoplamento crítico da IM para vários tamanhos de cadeias, mostrando assim que este é proporcional ao inverso do

tamanho da cadeia para sistemas unidimensionais.

O comportamento irregular apresentado no intervalo transitório foi analisado com mais detalhes na Figura 2.6, onde nesta mostra-se a evolução temporal da distribuição de probabilidade da função de onda para $\chi > \chi_{IM}$ em cadeias com $L = 100$ sítios. A medida que os valores de χ se afastam do limiar da IM o regime de *breathers* torna-se mais complexo e um pouco acima do limiar de *self-trapping* o estado transiente é superado e então a função de onda atinge o estado localizado. Os autores mostraram ainda que neste intervalo transiente o pacote de onda eletrônico segue uma dinâmica tipo caótica.

Figura 2.6: Evolução temporal da distribuição de probabilidades da função de onda em uma cadeia com $N = 100$ sítios para alguns valores do acoplamento efetivo acima da transição da instabilidade modulacional. $\chi = 0.290$: Logo acima da transição da IM, um padrão bastante regular respirante ocorre entre o estado uniforme e o localizado. $\chi = 1.0$: A respiração torna-se mais complexos com oscilações entre estados localizados distintos. $\chi = 3.0$: Como uma parte adicional da IM, oscilações do tipo caóticas entre vários estados localizados são desenvolvidas. $\chi = 4.5$: Acima de χ_{ST} uma solução localizada estacionária emerge após um tempo transiente com oscilações do tipo caóticas.



Fonte: Chaves, *et al* (2015)[13].

Em contraste com o regime de instabilidade e o regime de auto-armadilhamento ficou demonstrado também que para cadeias discretas existe um regime intermediário e a transição do estado estendido para o estado aprisionado não ocorre diretamente. No entanto, Chaves *et al* (2015) [13] mostraram que para redes quadradas essa transição é

direta.

Em resumo, observamos que o parâmetro χ_{IM} característico da IM é menor que o de auto-aprisionamento ($\chi_{IM} = 0.197 < \chi_{ST} = 4.500$) e na região entre esses valores ($\chi_{IM} < \chi < \chi_{ST}$) ocorre uma rica e interessante dinâmica como se observa nas Figuras 2.5a e 2.6.

A seguir, continuaremos nossa discussão com os resultados inéditos deste trabalho referentes a Instabilidade Modulacional numa rede discreta unidimensional, onde agora consideraremos também no nosso modelo um termo cinético de longo alcance decaindo com uma lei de potência, o qual passará a ter uma forte dependência com a distância inter-sítios, influenciando assim o salto quântico eletrônico ao longo da cadeia.

Instabilidade Modulacional numa cadeia com *hopping* de longo alcance

Motivados pelos estudos apresentados no fim do capítulo anterior, apresentamos neste capítulo nossos estudos sobre a instabilidade modulacional em redes discretas unidimensionais cujo *hopping* é de longo alcance, regido por uma lei de potência do tipo $1/r^\alpha$ além da apresentação e descrição mais detalhada do modelo estudado, exibiremos também os resultados sobre a dinâmica do pacote de onda neste sistema, assim como sua relação com o expoente do *hopping* de longo alcance. A investigação da IM em cadeias discretas com este tipo de interação foi realizada no intuito de examinar sua influência sobre a dinâmica eletrônica e estabilidade neste tipo de sistema.

Portanto, aqui será fornecido resultados numéricos do mapeamento da instabilidade modulacional referente a evolução temporal de um pacote de onda eletrônico na cadeia discreta, onde esta dinâmica é regida pela ENLDS com um termo de *hopping* de longo alcance.

3.1 Descrição do modelo

O interesse sobre o entendimento do mecanismo de interação de longo alcance e sua influência na dinâmica de vários sistemas físicos (BEC, spins e elétrons), bem como sobre o controle do *range* de interação entre partículas tem crescido consideravelmente dentro da comunidade científica nos últimos anos [14, 25–32]. Temos visto que em sistemas de baixa dimensionalidade este tipo de interação afeta crucialmente os efeitos que ocorrem em

sua ausência, de modo que é possível induzir fenômenos evidenciados apenas em sistemas com maior dimensionalidade nos de baixa dimensão. Passaremos a apresentar um modelo de interação de longo alcance entre íons de uma rede discreta unidimensional que é objeto de estudo deste trabalho.

O transporte eletrônico descrito via ENLDS com o termo de *hopping* de primeiros vizinhos ocorre quando o salto quântico eletrônico só é possível para os sítios imediatamente próximos, da esquerda ou direita ($j - 1$ e $j + 1$). Por simplicidade, tal termo de transferência ($V_{j\pm 1}$) relativo ao salto do elétron é geralmente tomado a um valor constante ($V = 1$) como temos na equação 2.54, reescrita nesta forma,

$$i \frac{\partial \psi_j}{\partial t} = V [\psi_{j-1} + \psi_{j+1}] - \chi |\psi_j|^2 \psi_j . \quad (3.1)$$

O norteamento para a presente investigação finca-se agora em considerar a probabilidade que o salto eletrônico possa ocorrer não somente para os primeiros vizinhos, mas para qualquer sítio da cadeia onde, doravante, o termo de *hopping* V diminui a medida que consideramos um vizinho mais longínquo. No contexto aqui explorado, tal termo de *hopping* V_{ij} estará sujeito a uma dependência com o inverso de uma lei de potência da distância inter-sítios $|i - j|$, da seguinte maneira:

$$V \quad \Longrightarrow \quad V_{ij} = \frac{1}{|i - j|^\alpha}, \text{ para } i \neq j. \quad (3.2)$$

Neste modelo consideramos o expoente do *hopping* no intervalo $\alpha > 1$. Este expoente é um número real e controla a intensidade do termo V_{ij} , significando que a intensidade da transferência do elétron de um sítio para outro qualquer varia tanto com o valor de α quanto com a distância inter-sítios. Desse modo, a medida que tomarmos valores maiores de α a probabilidade do salto eletrônico entre estes vizinhos diminui ainda mais drasticamente. Trabalhos recentes têm sido realizados levando em conta este tipo de dependência em termos de interações [1, 29, 82–85]. Desse modo, podemos reescrever a ENLDS no regime adiabático, no qual a dinâmica da rede ocorre mais lentamente em relação à dinâmica eletrônica, da seguinte forma:

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \sum_m V_{nm} \psi_m - \chi |\psi_n|^2 \psi_n . \quad (3.3)$$

Como apresentado anteriormente, temos como condição inicial uma função de onda contínua, cuja amplitude é $\psi_0 = 1/\sqrt{N}$, uniformemente espalhada pelos N sítios da

cadeia. À amplitude dessa onda estacionária é superposto um pequeno ruído distribuído aleatoriamente em cada sítio num intervalo de $[0, 10^{-3}\psi_0]$. O sistema está sujeito a uma condição periódica de contorno, onde a norma unitária da função de onda é conservada por meio de uma normalização própria. Tal condição inicial é a mesma proposta adotada na referência [13].

O conjunto de equações discretas foram resolvidas numericamente por meio da utilização de um algoritmo via método Runge-Kutta de oitava ordem, em que a discretização do tempo foi da ordem de $\Delta t = 10^{-2}$, intervalo este que foi suficiente para garantir a acurácia e precisão na norma da função de onda de maneira que $\left[1 - \sum_n |\psi_n|^2\right] \leq 10^{-12}$. Através da função participação definida na equação 2.78, acompanharemos a evolução temporal do pacote de onda eletrônico. Para uma pacote de onda totalmente estendido o número de participação é igual ao número de sítios da rede ($P(t) = N$) e para uma localização da onda num único sítio ela torna-se unitária ($P(t) = 1$).

A seguir iremos analisar um caso limite no qual recuperamos a dinâmica eletrônica relacionada a um *hopping* de primeiros vizinhos numa cadeia discreta a partir do modelo com termo cinético de longo alcance na ENLDS. A discussão prossegue com a apresentação de novos resultados e a subsequente análise dos mesmos em outros regimes deste modelo generalizado.

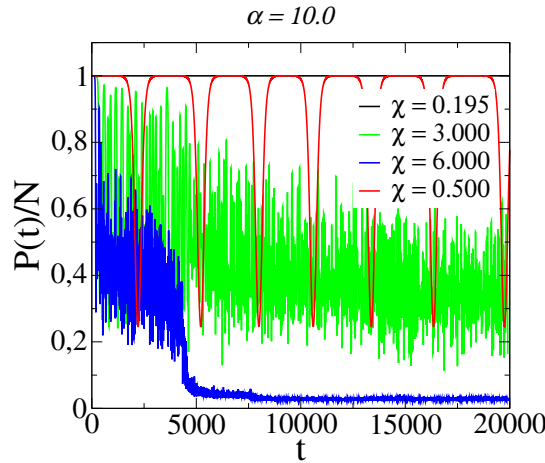
3.2 Resultados

Em redes discretas unidimensionais, alguns trabalhos anteriores investigaram a instabilidade modulacional na dinâmica eletrônica onde o termo de *hopping* é de curto alcance [13,81]. Foi demonstrado nestes trabalhos que o parâmetro crítico de acoplamento χ_{IM} , para o qual ocorre a instabilidade modulacional, escala linearmente com o inverso da tamanho lateral $N = L$ da cadeia. Por outro lado, em redes bidimensionais χ_{IM} permanece constante. Nestes resultados também ficou evidente a existência de um regime intermediário entre a região de estabilidade e a região de auto-aprisionamento do pacote eletrônico. Tal regime transiente exhibe um comportamento muito rico, indo de um padrão respirante na participação, com oscilações cada vez mais frequentes logo acima de χ_{IM} , à uma dinâmica tipo caótica da função de onda. Para redes bidimensionais, estes estudos revelaram que este regime intermediário presente para cadeias desaparece completamente.

Ou seja, a transição entre o regime estendido e o de auto-aprisionamento ocorre de forma direta em redes bidimensionais.

Semelhantemente investigou-se aqui, como se dá a dependência de χ_{IM} em relação ao tamanho L da cadeia. Também é relevante entender de que forma o termo cinético de longo alcance influencia na relação entre χ_{IM} e L . Foi possível, por exemplo, recuperar a partir deste novo modelo de *hopping* de longo alcance resultados já demonstrados para o caso de *hopping* de primeiros vizinhos indicando de certa forma a validade do modelo generalizado que ora adotamos. Para isto, consideramos o caso em que o expoente do *hopping* seja muito grande, tipicamente $\alpha = 10$. A transição para a fase de instabilidade ocorre próximo de $\chi_{IM} \approx 0.2$ acima do qual o número de participação passa a oscilar periodicamente como mostra a Figura 3.1. As oscilações tornam-se cada vez mais aleatórias e irregulares a medida que aumentamos a intensidade de acoplamento da não linearidade, até localizar em torno de uma pequena fração de sítios da cadeia para $\chi \approx 4$, indicando a fase de *selftrapping* do pacote de onda.

Figura 3.1: Evolução temporal do número de participação normalizado numa cadeia 1D de 101 sítios exibindo os regimes estendido ($\chi = 0.195$), *breathers* ($\chi = 0.500$), oscilação aleatória ($\chi = 3.000$) e aprisionado ($\chi = 6.000$) da função de onda para $\alpha = 10$.

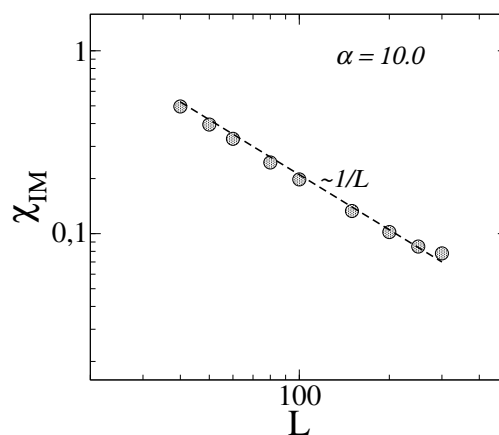


Fonte: Autor, 2018.

Nosso modelo descreveu com precisão o comportamento do parâmetro de acoplamento χ_{IM} em função do tamanho L da cadeia para grandes valores do expoente de *hopping* ($\alpha = 10$), reproduzindo um resultado semelhante ao modelo e previsão analítica feita com o *hopping* de curto alcance como esperávamos que aconteceria. De fato vemos que os dados numéricos (círculos) concordam com boa aproximação com a curva tracejada

onde χ_{IM} escala linearmente com o inverso do tamanho da cadeia como podemos ver na Figura 3.2. Um procedimento análogo ao apresentado aqui e diversas outras considerações serão feitas para outros tamanhos de cadeias e também considerando diversos valores de α , cujos resultados explicitaremos e discutiremos adiante. Desse modo, para $\alpha = 10$, o termo cinético 3.2 apresenta valores significativos apenas para sítios vizinhos de primeira ordem, o que portanto reproduz a dinâmica apresentada na seção 2.4.2.

Figura 3.2: Estimativa numérica do parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus tamanho da cadeia para $\alpha = 10$.

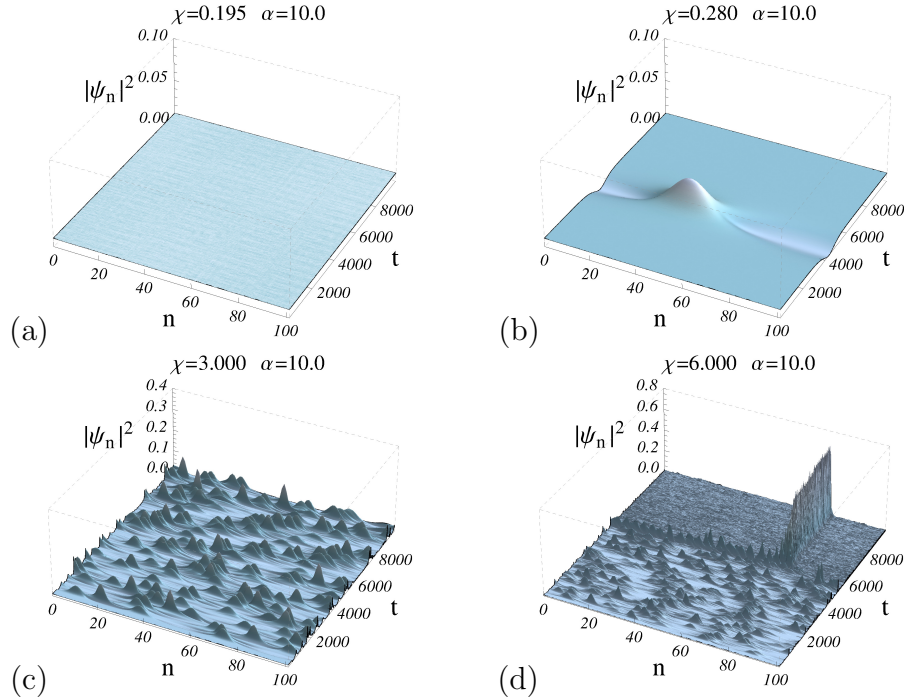


Fonte: Autor, 2018.

Na Figura 3.3 abaixo, reproduzimos a evolução temporal da densidade de probabilidade referente a um pacote de onda de um elétron numa cadeia com 101 sítios. Assim, percebe-se que para este valor de α a dinâmica ocorre como no caso usual com termo cinético de curto alcance, onde os regimes estendidos, *breathers*, transiente irregular e localizado foram identificados. O pacote de onda permanece estável para $\chi = 0.195$ visto que a distribuição de probabilidade estende-se uniformemente por toda a cadeia ao longo de toda evolução considerada. Um perfil oscilante emerge para uma intensidade de não linearidade $\chi = 0.280$ logo acima do limiar crítico de transição ($\chi_{IM} \approx 0.2$), indicando um sinal de instabilidade na amplitude do pacote de onda. A partir desse estágio, o padrão de respiro do pacote de onda torna-se bastante irregular ($\chi = 3.000$) e cada vez mais complexo ($\chi = 6.000$), aparecendo diversos picos na distribuição de probabilidade em vários pontos da cadeia. Entretanto, para $\chi = 6.000$ após um transiente a dinâmica evolui para um estado fortemente localizado.

A análise subsequente para o caso $2.0 \leq \alpha < 10.0$ será feita em detalhes a seguir, onde apresentaremos um estudo da influência do expoente α sobre a dinâmica eletrônica

Figura 3.3: Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia de 101 sítios considerando $\alpha = 10$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 0.195$), (b) *breathers* ($\chi = 0.280$), (c) transiente ($\chi = 3.000$) e (d) aprisionado ($\chi = 6.000$).



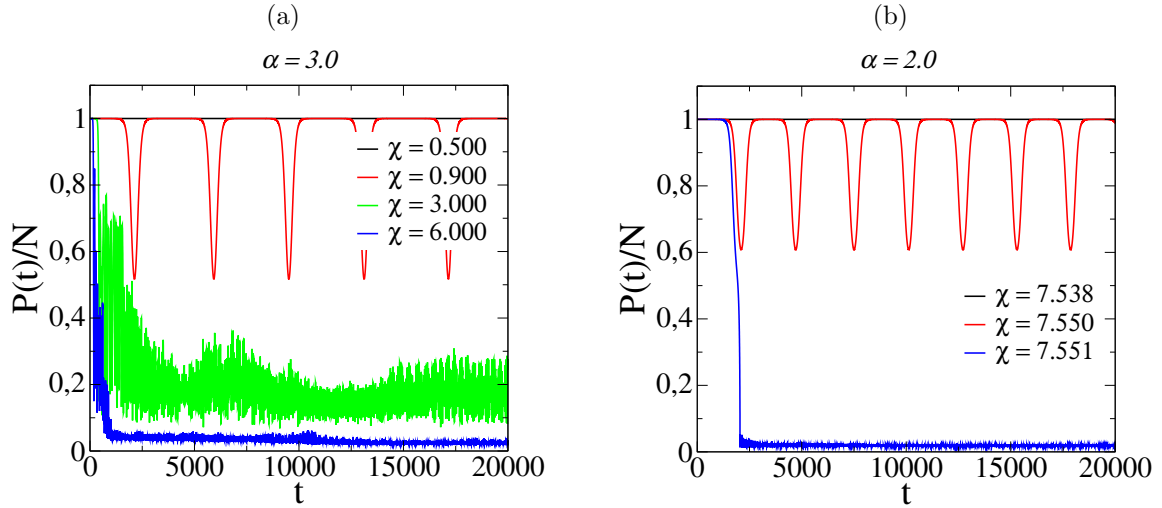
Fonte: Autor, 2018.

bem como também sobre o fator crítico χ_{IM} de acoplamento característico da instabilidade modulacional. Para isto, seguimos agora com a investigação mapeando o comportamento de χ_{IM} para uma cadeia com $N = 100$ sítios considerando alguns valores do expoente α ($\alpha = 3.0$ e $\alpha = 2.0$) que, para efeito comparativo, consta nas Figuras 3.4a e 3.4b a seguir.

Como podemos observar nestes resultados, ao considerarmos este intervalo ($3.0 \leq \alpha < 10.0$) nos valores para o expoente de *hopping*, os regimes estendido ($\chi = 0.500$), o de oscilações ($\chi = 0.900$) e o estado transiente ($\chi = 3.000$), que antecede a localização da função de onda, ainda persistem até para $\alpha = 3.0$. No entanto, para $\alpha = 2.0$ o regime transiente de dinâmica irregular no respiro do número de participação do pacote de onda eletrônico é suprimido, ocorrendo uma transição direta do estado *breathers* para o regime aprisionado.

Observamos também nesse intervalo a medida que α diminui, para que a transição para a fase de instabilidade ocorra torna-se necessário intensidades de χ_{IM} cada vez maiores. Adiante iremos explorar pormenorizadamente este comportamento. Os limiares

Figura 3.4: Evolução temporal do número de participação numa cadeia de 101 sítios considerando (a) $\alpha = 3$ e (b) $\alpha = 2$ exibindo os regimes estendido, *breathers*, transiente e aprisionado da função de onda.

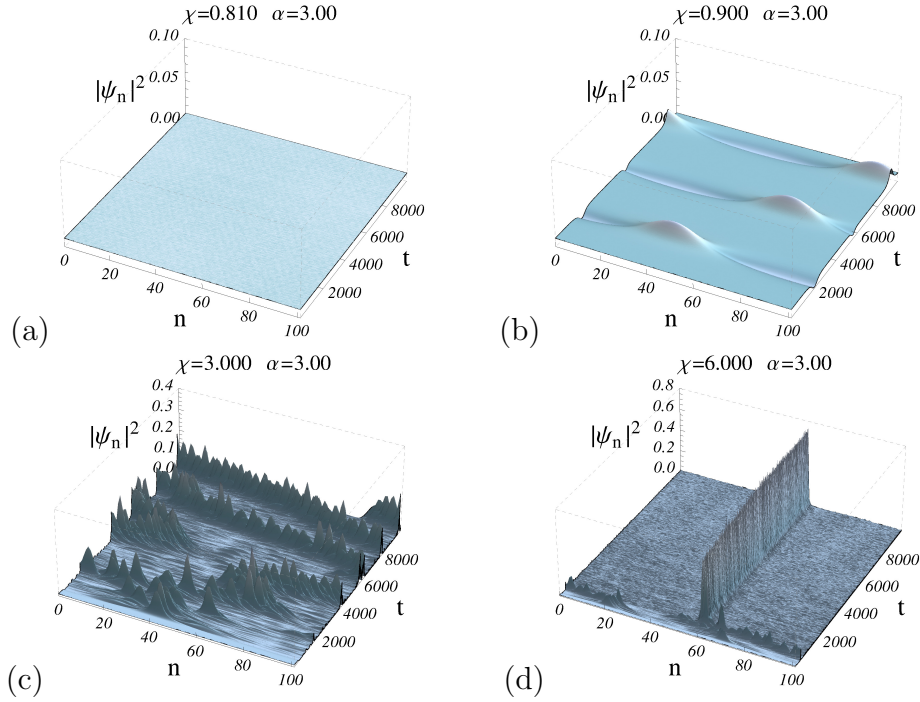


Fonte: Autor, 2018.

de ocorrência da IM crescem para valores menores de α , de modo que para $\alpha = 3.0$ o parâmetro crítico característico situa-se nas proximidades de $\chi = 0.500$ acima do qual o pacote de onda eletrônico evolui para uma dinâmica tipo *breathers*. Atingindo para valores acima de $\chi = 4.000$ o estado de auto-aprisionamento. O mesmo ocorre para $\alpha = 2.0$, embora com valores ainda maiores de χ , com valor em torno de $\chi \approx 7.540$ para os regimes respirante e de forte aprisionamento do pacote de onda ($\chi = 7.551$) como mostra a Figura 3.4b. Uma melhor visualização e compreensão do que ocorre a medida que o expoente de *hopping* diminui pode ser vista também por meio da Figura 3.5. Nestas podemos ver a evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda eletrônica para $\alpha = 3.0$ nos regimes estendidos, *breathers*, transiente irregular e o de auto-armadilhado respectivamente para os valores de χ : 0.810, 0.900, 3.000 e 6.000. Deprendemos disso que a solução de onda contínua *CW* mostra-se instável para $\alpha > 3$, uma vez que o parâmetro de acoplamento χ_{IM} assume valores cada vez menores com o aumento de α .

Como pontuado anteriormente, alguns novos e interessantes detalhes ocorrem a medida que nos aproximamos de $\alpha = 2.0$. Um destes, consiste no fato do intervalo transitório de dinâmica irregular, que ocorre antes do aprisionamento, diminuir consideravelmente. O outro está relacionado com o aumento no pico da distribuição de probabilidade

Figura 3.5: Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia de 101 sítios considerando $\alpha = 3.0$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 0.810$), (b) *breathers* ($\chi = 0.900$), (c) transiente ($\chi = 3.000$) e (d) aprisionado ($\chi = 6.000$).

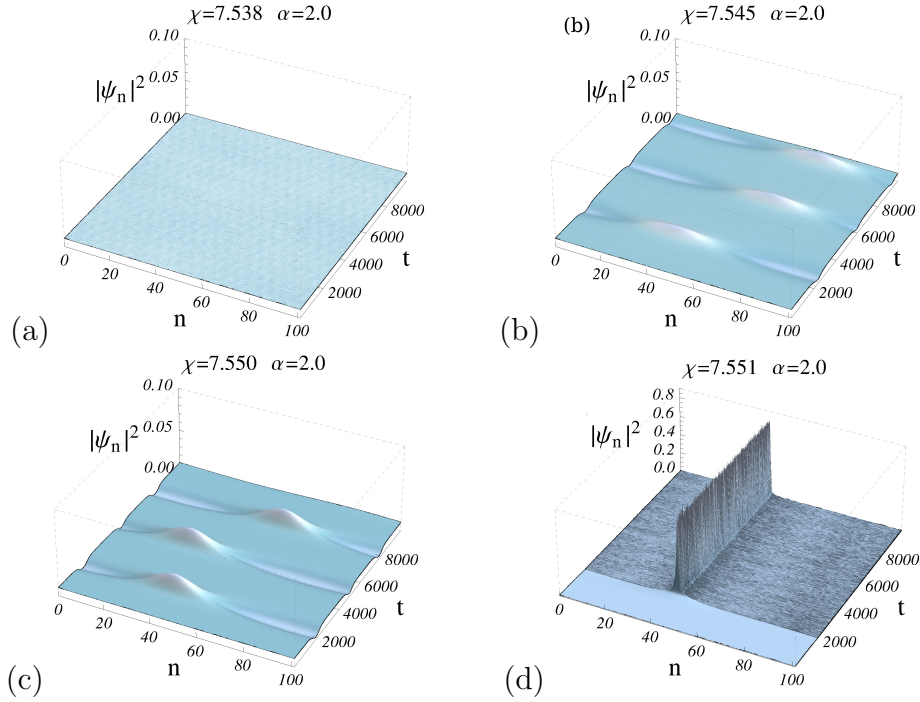


Fonte: Autor, 2018.

do perfil oscilante. A Figura 3.6 revela detalhadamente este comportamento. O pacote de onda permanece estendido para $\chi = 7.538$, acima disto a dinâmica é levada para o regime de oscilações periódicas ($\chi = 7.545$). Aumentando o pico da densidade de probabilidade dos modos oscilantes centralizados em pontos diferentes da cadeia para $\chi = 7.550$ e logo em seguida para $\chi = 7.551$ evolui diretamente para o estado localizado sem apresentar o regime transitório de oscilações irregulares observado para valores maiores do expoente α .

Esta mudança caracterizada pelo desaparecimento da fase de dinâmica caótica era esperada, em razão da análise de dimensionalidade efetiva $d_{ef} = 2/\alpha - 1$ para uma rede regular d -dimensional mostrar que o limiar $\alpha = 3$ indica uma transição da dimensão unidimensional (1D) para dimensões maiores. Tal mudança de comportamento assemelha-se também ao que foi apresentado por Chaves *et al* (2015) para as redes discretas bidimensionais, onde a dinâmica caótica também está ausente. Os resultados numéricos e analíticos concordam e indicam que nas proximidades desse valor do expoente de *hopping* ocorre

Figura 3.6: Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia 1D de 101 sítios considerando $\alpha = 2.0$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 7.538$), (b) e (c) *breathers* ($\chi = 7.545, 7.550$) e (d) aprisionado ($\chi = 7.551$).

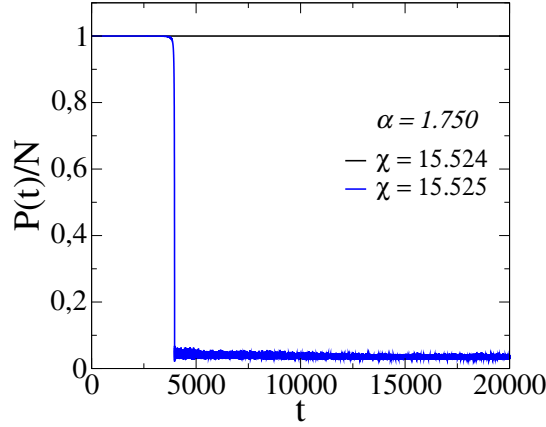


Fonte: Autor, 2018.

uma mudança na topologia efetiva (dimensionalidade) do sistema, no sentido de que é como se a função de onda enxergasse agora não mais uma rede unidimensional, corroborando com o esperado para sistemas unidimensionais com interação de longo alcance, onde efeitos presentes em dimensões topológicas maiores podem ocorrer nestes [29].

Seguindo de forma análoga, mapeamos a dinâmica de evolução do número de participação normalizado para $\alpha = 1.75$ como mostra a Figura 3.7. Neste caso observou-se a inexistência de regimes intermediários na dinâmica eletrônica, apresentando apenas os regimes estendido até $\chi = 17.524$ e o localizado a partir de $\chi = 17.525$. O estado auto-armadilhado, como observado, ocorre somente para altos valores do parâmetro de acoplamento χ indicando que a função de onda uniforme inicial tende ser uma solução estável para $\alpha < 3$. Especificamente até o valor $\chi = 15.524$ o estado eletrônico permanece estendido e para o valor imediatamente posterior $\chi = 15.525$ a dinâmica evolui, depois de certo tempo, para o estado localizado. Aumentando ainda mais o fator χ , como podemos ver nas Figuras 3.8c e 3.8d, o pacote de onda eletrônico auto-aprisiona mais rapidamente.

Figura 3.7: Evolução temporal do número de participação normalizado numa cadeia 1D de 100 sítios exibindo os regimes estendido ($\chi = 17.524$) e aprisionado ($\chi = 17.525$) da função de onda para $\alpha = 1.750$.

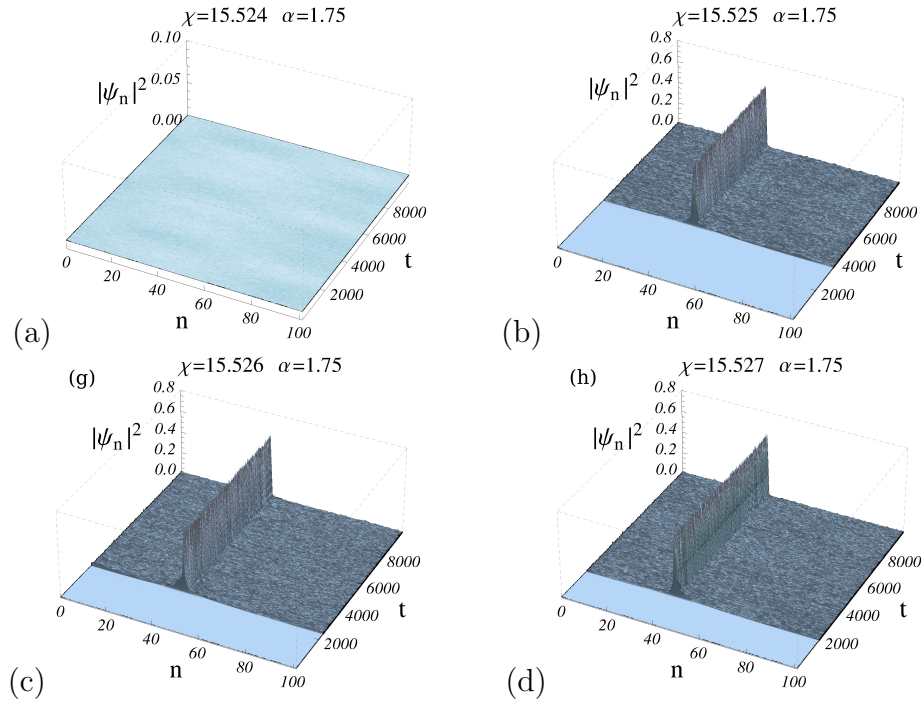


Fonte: Autor, 2018.

Para um estudo complementar, no intuito de inferir como se dá a dinâmica da função de onda eletrônica em termos do parâmetro de acoplamento χ , computamos os mínimos locais do número de participação $P_{min}(t)$ em função do tempo. Este procedimento ocorreu numa faixa de intensidades de χ que estende-se a todos os regimes da dinâmica do pacote de onda descritos previamente considerando um intervalo de tempo t compreendido entre $80000 < t < 100000$. Na parte (a) da Figura 3.9, onde tem-se $\alpha = 10$, observamos um regime de oscilações periódicas entre os estados estendido e localizado em torno de $\chi = 0.2$. Para valores superiores a $\chi = 0.8$ findam-se as oscilações periódicas e a dinâmica do sistema adentra num comportamento bastante irregular indicado pela função participação assumindo inúmeros mínimos aleatoriamente, padrão este que persisti até $\chi = 3.9$ aproximadamente. Neste interlúdio ($0.8 \lesssim \chi \lesssim 3.9$) os numerosos mínimos preenchem de forma bastante concentrada um intervalo de diferentes valores do número de participação. Finalmente em $\chi > 4$ a função de onda eletrônica ascende para o regime de auto-aprisionamento.

A parte (b) da Figura 3.9 mostra que para $\alpha = 3.0$ permanece um comportamento similar ao descrito na parte (a) da mesma figura. Neste caso também, a função participação apresenta inicialmente oscilações periódicas entre os estados uniforme e localizado, posteriormente apresenta numerosos mínimos com um padrão premtoriamente

Figura 3.8: Evolução temporal da densidade de probabilidade da função de onda numa cadeia de 101 sítios considerando $\alpha = 1.75$ exibindo os regimes (a) estendido ($\chi = 15.524$), (b), (c) e (d) aprisionado ($\chi = 15.525, 15.526, 15.527$).

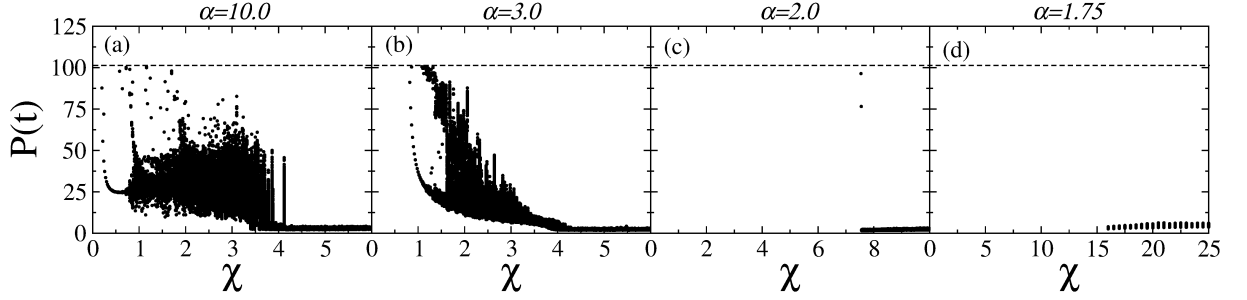


Fonte: Autor, 2018.

irregular para valores no intervalo $1.5 < \chi < 3.5$. Esta semelhança excetua-se por uma diminuição do padrão de respiração e pelo fato de que a faixa de valores de χ para a qual a alta densidade de pontos mínimos da participação assumi o padrão irregular é mais estreita que para $\alpha = 10.0$.

Nas últimas duas partes da Figura 3.9, onde temos em (c) $\alpha = 2.0$ e em (d) $\alpha = 1.75$, nota-se o findar completo do regime de oscilações irregulares da função participação. A ocorrência da supressão das oscilações regulares, entre o regime uniforme e o auto-armadilhado, está presente ainda que ligeiramente para $\alpha = 2.0$ e desaparece integralmente para $\alpha = 1.75$. Agora a transição direta entre a função de onda estendida e a auto-aprisionada é novamente observada. De modo que, como ressaltado anteriormente, esta transição direta é uma característica que foi identificada por Chaves *et al.*(2015) [13] em redes discretas bidimensionais. Estes resultados numéricos indicam que em $\alpha = 2.0$ a dimensionalidade efetiva do sistema é de fato $d_{ef} = 2$, uma vez que nesta região o efeito observado é típico de redes bidimensionais. Desse modo, para $\alpha = 2.0$ deve haver uma

Figura 3.9: Diagrama mostrando o número de participação mínimo local em função de χ resultante da dinâmica de um pacote de onda eletrônico inicialmente uniforme numa cadeia discreta com 101 sítios para diversos valores do expoente do *hopping*: (a) $\alpha = 10$, (b) $\alpha = 3$, (c) $\alpha = 2$ e (d) $\alpha = 1.75$.



Fonte: Autor, 2018.

separação de uma região em que χ_{IM} diminui com o tamanho da cadeia de outra região onde χ_{IM} deve crescer como o tamanho da cadeia. Isso nos motivou a entender melhor esta transição e o limiar onde ela ocorre.

É importante lembrar que em uma rede regular d -dimensional com condições de contorno periódicas, o vetor de onda mínimo para uma perturbação harmônica é da ordem de $k_{min} = 2\pi/L$, onde $L = N^{1/d}$ é o tamanho lateral da rede. Isto indica que a solução CW permanece estável sempre que k_{IM} é menor que k_{min} e instável no caso contrário. Desse modo a instabilidade modulacional se desenvolve sempre que:

$$k_{IM} > k_{min} \quad (3.4)$$

e usando o fato de $k_{IM} = \sqrt{2\chi_{IM}/N}$ e $k_{min} = 2\pi/N^{1/d}$ encontramos a seguinte relação:

$$\chi_{IM} \propto N^{1-2/d} \quad (3.5)$$

Deste resultado, vemos que somente para $d = 2$ o fator de acoplamento crítico χ_{IM} é independente do tamanho do sistema. Esta relação implica também que χ_{IM} diminui continuamente com o tamanho N indicando que para $d < 2$ a solução CW será modulacionalmente instável no limite termodinâmico para qualquer valor finito do parâmetro de acoplamento da não linearidade. Por outro lado, a divergência de χ_{IM} para $d > 2$ aponta para uma forte estabilidade da solução CW, independentemente do parâmetro de acoplamento da não linearidade em redes de alta dimensão.

Esta mesma análise pode ser estendida ao comportamento da instabilidade modulacional em cadeias com amplitudes de *hopping* decrescentes segundo uma lei de potência. Assumindo $d_{ef} = 2/(1 - \alpha)$ como a dimensionalidade efetiva controlando a estabilidade da solução CW em relação as perturbações harmônicas para o regime de longo alcance ($1 < \alpha < 3$), observamos que o parâmetro crítico de acoplamento da não linearidade obedece a seguinte relação:

$$\chi_{IM} \propto N^{2-\alpha} \quad (3.6)$$

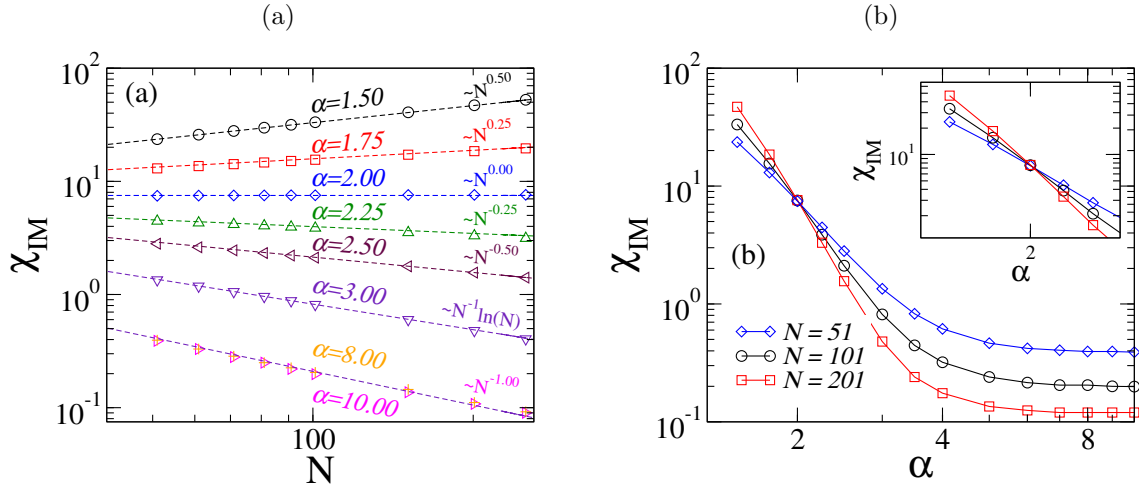
Por outro lado, no regime efetivo de curto alcance ($\alpha > 3$) o escalonamento de χ_{IM} independe de α , onde neste caso:

$$\chi_{IM} \propto N^{-1} \quad (3.7)$$

No intuito de visualizarmos melhor este comportamento, realizamos o mapeamento numérico de χ_{IM} em função do tamanho $N=L$ da cadeia para vários valores de α como ilustrado na Figura 3.10a. Para $\alpha > 3$ temos o comportamento usual discutido na seção 3.2 em acordo com a previsão analítica $\chi_{IM} = 2\pi^2/L$, ou seja, χ_{IM} diminui com o aumento do tamanho L da cadeia. Este comportamento descendente vai suavizando a medida que consideramos α menores e tende a desaparecer para $\alpha < 3.0$, acima do qual passa a dominar um comportamento distinto de $\chi_{IM} \propto N^{-1}$ observado para $\alpha > 3.0$. Exatamente em $\alpha = 3$ inicia um regime de dimensões espectrais maiores, onde os dados numéricos mostram a presença de uma correção logarítmica na escala com $\chi_{IM} \propto \ln(N)/N$. E para valores menores de α a previsão $\chi_{IM} \propto N^{2-\alpha}$ é obtida precisamente. Os valores de χ_{IM} independentes do tamanho da cadeia ocorrem exatamente para $\alpha = d_{ef} = 2$, onde a instabilidade modulacional emerge próximo de $\chi_{IM} = 7.7$.

Investigando mais a fundo, observa-se que em $\alpha = 2.0$ ocorre um cruzamento das curvas da relação de dependência de χ_{IM} com o tamanho da cadeia L , para cadeias de 51, 101 e 201 sítios, considerando vários valores de α num intervalo de 1.5 até 10. A Figura 3.10b mostra o diagrama de fase χ_{IM} versus α para alguns tamanhos de cadeia. Podemos aferir então que existe duas fases distintas com comportamentos totalmente opostos na dependência de χ_{IM} em termos do tamanho L da cadeia. Portanto, para α maior ($d_{ef} < 2$) o parâmetro crítico característico da não linearidade para IM diminui com o aumento do tamanho da cadeia, de outro modo, para α menor ($d_{ef} > 2$) o parâmetro de acoplamento χ_{IM} passa a crescer a medida que tomamos cadeias maiores. Assim, no

Figura 3.10: (a) Estimativa numérica do parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus tamanho da cadeia para diversos valores de α (1.50, 1.75, 2.00, 2.25, 3.00, 8.00 e 10.00). (b) Relação entre o parâmetro de acoplamento característico da instabilidade modulacional χ_{IM} versus expoente α para diversos tamanhos de cadeias ($L = 51, 101$ e 201).



Fonte: Autor, 2018.

limite termodinâmico χ_{IM} tende a divergir tornando o estado CW uma solução sempre estável.

Em resumo, na Figura 3.10b vemos que as curvas, para os tamanhos de 51, 101 e 201 sítios, vão se aproximando a medida que α diminui a partir de 10.0 e cruzam-se em $\alpha = 2$, onde a partir daí começam a divergir afastando-se umas das outras evidenciando a mudança de comportamento que ocorre nesta transição. Assim, na região em que $\alpha > 3$ o sistema comporta-se como uma rede unidimensional para um termo cinético de menor intensidade (α grande), para $\alpha = 2$ o sistema passa a comportar-se como no caso de uma rede bidimensional no qual o parâmetro crítico característico da instabilidade χ_{IM} permanece constante independentemente do tamanho do sistema. Por fim, na região onde o termo cinético é de longo alcance (α pequeno) o padrão de comportamento inverte. Neste último caso, é necessário uma não linearidade muito forte devido ao termo cinético de alta magnitude (α pequeno) para ocorrer uma mudança do estado estendido até atingir a instabilidade modulacional e conseqüentemente todas as outras fenomenologias já discutidas anteriormente.

Conclusões e Perspectivas

Em resumo, investigamos numericamente neste trabalho a Instabilidade Modulacional na dinâmica de um pacote de onda eletrônico distribuído uniformemente sobre todos os sítios de uma cadeia discreta unidimensional com uma interação de longo alcance entre os íons que decai seguindo uma lei de potência ($1/r^\alpha$). Na amplitude da onda foi adicionado um pequeno ruído distribuído aleatoriamente sobre os sítios da rede. O pacote de onda está submetido a um acoplamento com os modos vibracionais dos íons da rede, onde a intensidade desse acoplamento é regido pelo fator χ da não linearidade e uma condição periódica de contorno é aplicada ao sistema que é regido pela Equação Não Linear Discreta de Schrödinger (ENLDS).

Algumas questões de interesse neste sistema foram investigadas. Uma delas refere-se ao mapeamento de qual intensidade do expoente do hopping α recupera a dinâmica de primeiros vizinhos e identificar o parâmetro crítico da não linearidade χ_{IM} que separa as regiões de estabilidade e instabilidade. A outra questão trata-se de: tomando fixo um tamanho de cadeia, entender como o *hopping* de longo alcance afeta χ_{IM} . E por último, averiguar os possíveis novos efeitos que surgiriam quando o valor de α torna a interação de longo alcance do *hopping* considerável.

A dimensionalidade efetiva d_{ef} do sistema está fortemente relacionada com o expoente de *hopping* α , de modo que para $\alpha \leq 3$ temos $d_{ef} = 2/(\alpha - 1)$ e para $\alpha > 3$ temos $d = 1$. No primeiro caso a instabilidade do estado CW ocorre para $\chi_{IM} \propto N^{2-\alpha}$, e no segundo, $\chi_{IM} \propto N^{-1}$. Demonstrou-se também que o expoente α que modula a lei de potência no *hopping* de longo alcance influencia fortemente o parâmetro de acoplamento crítico característico da IM. Mapeamos três regimes que determinam esta influência sobre

χ_{IM} . A primeira região ($\alpha > 3$) mostra que χ_{IM} diminui com o tamanho da cadeia, de modo que para pequenas não linearidades a função de onda torna-se instável. Na segunda região ($\alpha = 2$) observamos que χ_{IM} mantêm-se constante em relação ao tamanho do sistema, resultado que é análogo ao que ocorre com redes quadradas. E na última região ($\alpha < 2$) o pacote de onda tende a permanecer estável, visto que agora χ_{IM} cresce com o tamanho da cadeia.

Outro importante resultado apresentado consiste no fato de que ao inserirmos o termo de *hopping* de longo alcance na dinâmica da função de onda eletrônica, regida pela ENLDS para o caso de uma rede com topologia unidimensional, foi possível obtermos um efeito concernente a redes bidimensionais quadradas. Ou seja, a presença de um termo cinético de longo alcance, do tipo lei de potência analisado neste trabalho, levou o sistema a uma dimensionalidade efetiva diferente da espacial (1D). Os resultados numéricos indicam que o limiar onde ocorre essa transição na dimensionalidade efetiva do sistema ocorre em $\alpha = 3$ em concordância com muitos resultados pesentes na literatura.

Diante dos resultados apresentados no capítulo anterior, outros contextos podem ser explorados. Em analogia a alguns trabalhos desenvolvidos em óptica não linear e em transporte eletrônico, pretende-se ter como objeto de investigação a resposta não linear do meio em relação à interação com a onda uniforme fora da aproximação adiabática. Torna-se interessante levar em consideração o tempo de resposta do acoplamento elétron-rede bem como entender sua influência sobre as Instabilidade Modulacional da solução estacionária eletrônica numa cadeia 1D com interação de longo alcance entre íons.

Referências Bibliográficas

- [1] W. Krolikowski, O. Bang, J. J. Rasmussen, and J. Wyller, “Modulational instability in nonlocal nonlinear Kerr media,” *Phys. Rev. E*, vol. 64, p. 016612, Jun 2001.
- [2] V. V. Konotop and M. Salerno, “Modulational instability in Bose-Einstein condensates in optical lattices,” *Phys. Rev. A*, vol. 65, p. 021602, Jan 2002.
- [3] A.-X. Zhang and J.-K. Xue, “The dynamics and stabilities of Bose-Einstein condensates in deep optical lattices,” *Physics Letters A*, vol. 372, no. 8, pp. 1147–1154, 2008.
- [4] B. K. Shivamoggi, “Relativistic modulational instability of an electromagnetic wave in a magnetized plasma,” *Phys. Rev. A*, vol. 31, pp. 1728–1730, Mar 1985.
- [5] A. Hasegawa, “Generation of a train of soliton pulses by induced modulational instability in optical fibers,” *Optics letters*, vol. 9, no. 7, pp. 288–290, 1984.
- [6] K. Tai, A. Tomita, J. Jewell, and A. Hasegawa, “Generation of subpicosecond solitonlike optical pulses at 0.3 thz repetition rate by induced modulational instability,” *Applied physics letters*, vol. 49, no. 5, pp. 236–238, 1986.
- [7] I. Amiri, M. Zulkifli, and H. Ahmad, “Soliton comb generation using add-drop ring resonators,” *International Research Journal of Telecommunications and Information Technology*, vol. 1, no. 1, pp. 002–008, 2014.
- [8] I. S. Amiri and A. Afroozeh, “Soliton generation based optical communication,” in *Ring Resonator Systems to Perform Optical Communication Enhancement Using Soliton*, pp. 49–68, Springer, 2015.

- [9] I. S. Amiri, S. E. Alavi, and S. M. Idrus, “Introduction of fiber waveguide and soliton signals used to enhance the communication security,” in *Soliton Coding for Secured Optical Communication Link*, pp. 1–16, Springer, 2015.
- [10] V. Bespalov, “Vi bespalov and vi talanov, jetp lett. 3, 307 (1966).,” *JETP Lett.*, vol. 3, p. 307, 1966.
- [11] T. B. Benjamin and J. E. Feir, “The disintegration of wave trains on deep water part 1. theory,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 27, no. 3, pp. 417–430, 1967.
- [12] P. Marquié, J. Bilbault, and M. Remoissenet, “Nonlinear schrödinger models and modulational instability in real electrical lattices,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 87, no. 1, pp. 371 – 374, 1995. Proceedings of the Conference on The Nonlinear Schrödinger Equation.
- [13] V. L. Chaves Filho, R. P. A. Lima, and M. L. Lyra, “Interplay between modulational instability and self-trapping of wavepackets in nonlinear discrete lattices,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 25, no. 6, p. 063101, 2015.
- [14] B. K. Esbensen, A. Wlotzka, M. Bache, O. Bang, and W. Krolikowski, “Modulational instability and solitons in nonlocal media with competing nonlinearities,” *Phys. Rev. A*, vol. 84, p. 053854, Nov 2011.
- [15] Y. S. Kivshar and G. Agrawal, *Optical solitons: from fibers to photonic crystals*. Academic press, 2003.
- [16] S. Flach and A. V. Gorbach, “Discrete breathers advances in theory and applications,” *Physics Reports*, vol. 467, no. 1-3, pp. 1–116, 2008.
- [17] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, “Modulational instability and complex dynamics of confined matter-wave solitons,” *Physical review letters*, vol. 91, no. 8, p. 080405, 2003.
- [18] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott, and R. G. Hulet, “Formation and propagation of matter-wave soliton trains,” *Nature*, vol. 417, no. 6885, p. 150, 2002.
- [19] S. L. Cornish, S. T. Thompson, and C. E. Wieman, “Formation of bright matter-wave solitons during the collapse of attractive Bose-Einstein condensates,” *Physical review letters*, vol. 96, no. 17, p. 170401, 2006.

- [20] G. D. McDonald, C. C. Kuhn, K. S. Hardman, S. Bennetts, P. J. Everitt, P. A. Altin, J. E. Debs, J. D. Close, and N. P. Robins, “Bright solitonic matter-wave interferometer,” *Physical review letters*, vol. 113, no. 1, p. 013002, 2014.
- [21] I. Ferrier-Barbut, M. Wenzel, M. Schmitt, F. Böttcher, and T. Pfau, “Onset of a modulational instability in trapped dipolar Bose-Einstein condensates,” *Physical Review A*, vol. 97, no. 1, p. 011604, 2018.
- [22] P. Everitt, M. Sooriyabandara, M. Guasoni, P. Wigley, C. Wei, G. McDonald, K. Hardman, P. Manju, J. Close, C. Kuhn, *et al.*, “Observation of a modulational instability in Bose-Einstein condensates,” *Physical Review A*, vol. 96, no. 4, p. 041601, 2017.
- [23] L. Carr and J. Brand, “Spontaneous soliton formation and modulational instability in Bose-Einstein condensates,” *Physical review letters*, vol. 92, no. 4, p. 040401, 2004.
- [24] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, “Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates,” *Physical Review A*, vol. 65, no. 4, p. 043614, 2002.
- [25] Y. S. Kivshar and M. Peyrard, “Modulational instabilities in discrete lattices,” *Phys. Rev. A*, vol. 46, pp. 3198–3205, Sep 1992.
- [26] W. Królikowski, O. Bang, N. I. Nikolov, D. Neshev, J. Wyller, J. J. Rasmussen, and D. Edmundson, “Modulational instability, solitons and beam propagation in spatially nonlocal nonlinear media,” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, vol. 6, no. 5, p. S288, 2004.
- [27] L. Santos, G. V. Shlyapnikov, and M. Lewenstein, “Roton-Maxon Spectrum and Stability of Trapped Dipolar Bose-Einstein Condensates,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, p. 250403, Jun 2003.
- [28] C. Trefzger, C. Menotti, B. Capogrosso-Sansone, and M. Lewenstein, “Ultracold dipolar gases in optical lattices,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 44, no. 19, p. 193001, 2011.

- [29] W. Dias, D. Bertrand, and M. Lyra, “Bose-Einstein condensation in chains with power-law hoppings: Exact mapping on the critical behavior in d-dimensional regular lattices,” *Physical Review E*, vol. 95, no. 6, p. 062105, 2017.
- [30] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, “Bose-Einstein condensation of chromium,” *Physical Review Letters*, vol. 94, no. 16, p. 160401, 2005.
- [31] R. Islam, C. Senko, W. C. Campbell, S. Korenblit, J. Smith, A. Lee, E. E. Edwards, C.-C. J. Wang, J. K. Freericks, and C. Monroe, “Emergence and frustration of magnetism with variable-range interactions in a quantum simulator,” *Science*, vol. 340, no. 6132, pp. 583–587, 2013.
- [32] J. W. Britton, B. C. Sawyer, A. C. Keith, C.-C. J. Wang, J. K. Freericks, H. Uys, M. J. Biercuk, and J. J. Bollinger, “Engineered two-dimensional ising interactions in a trapped-ion quantum simulator with hundreds of spins,” *Nature*, vol. 484, no. 7395, p. 489, 2012.
- [33] A. Malyshev, V. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, “Monitoring the localization-delocalization transition within a one-dimensional model with nonrandom long-range interaction,” *Physical Review B*, vol. 70, no. 17, p. 172202, 2004.
- [34] A. L. Burin, “Many-body delocalization in a strongly disordered system with long-range interactions: Finite-size scaling,” *Physical Review B*, vol. 91, no. 9, p. 094202, 2015.
- [35] F. Domínguez-Adame, V. Malyshev, F. De Moura, and M. Lyra, “Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder,” *Physical review letters*, vol. 91, no. 19, p. 197402, 2003.
- [36] F. A. De Moura and M. L. Lyra, “Delocalization in the 1D Anderson model with long-range correlated disorder,” *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 17, p. 3735, 1998.
- [37] K. Kosmidis, S. Havlin, and A. Bunde, “Structural properties of spatially embedded networks,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 82, no. 4, p. 48005, 2008.

- [38] M. Johansson, M. Hörnquist, and R. Riklund, “Effects of nonlinearity on the time evolution of single-site localized states in periodic and aperiodic discrete systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 52, pp. 231–240, Jul 1995.
- [39] P. K. Datta and K. Kundu, “Time evolution of models described by a one-dimensional discrete nonlinear Schrödinger equation,” *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 14929–14936, Jun 1996.
- [40] Z. Pan, S. Xiong, and C. Gong, “Effects of off-diagonal nonlinearity on the time evolution of an initially localized mode,” *Phys. Rev. E*, vol. 56, pp. 4744–4750, Oct 1997.
- [41] A. Davydov, “The theory of contraction of proteins under their excitation,” *Journal of Theoretical Biology*, vol. 38, no. 3, pp. 559 – 569, 1973.
- [42] V. M. Kenkre and D. K. Campbell, “Self-trapping on a dimer: Time-dependent solutions of a discrete nonlinear Schrödinger equation,” *Phys. Rev. B*, vol. 34, pp. 4959–4961, Oct 1986.
- [43] V. M. Kenkre and H.-L. Wu, “Time evolution of the nonadiabatic nonlinear quantum dimer,” *Phys. Rev. B*, vol. 39, pp. 6907–6913, Apr 1989.
- [44] T. Holstein, “Studies of polaron motion: Part i. the molecular-crystal model,” *Annals of Physics*, vol. 8, no. 3, pp. 325 – 342, 1959.
- [45] W. C. Kerr and P. Lomdahl, “Quantum-mechanical derivation of the equations of motion for Davydov solitons,” *Physical Review B*, vol. 35, no. 7, p. 3629, 1987.
- [46] L. Cruzeiro-Hansson and S. Takeno, “Davydov model: The quantum, mixed quantum-classical, and full classical systems,” *Physical Review E*, vol. 56, no. 1, p. 894, 1997.
- [47] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, “Solitons in polyacetylene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 42, pp. 1698–1701, Jun 1979.
- [48] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, “Soliton excitations in polyacetylene,” *Phys. Rev. B*, vol. 22, pp. 2099–2111, Aug 1980.

- [49] T. Holstein, “Studies of polaron motion: Part ii. the small polaron,” *Annals of Physics*, vol. 8, no. 3, pp. 343 – 389, 1959.
- [50] G. Agrawal, “Nonlinear fiber optics (san diego, ca: Academic),” 1995.
- [51] H. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A. Boyd, and J. Aitchison, “Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays,” *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 16, p. 3383, 1998.
- [52] A. Hasegawa, “Soliton effects in optical waveguides,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 65, no. 6, p. 999, 2002.
- [53] V. Zakharov and L. Ostrovsky, “Modulation instability: the beginning,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 238, no. 5, pp. 540–548, 2009.
- [54] G. P. Agrawal, “Nonlinear fiber optics: its history and recent progress,” *JOSA B*, vol. 28, no. 12, pp. A1–A10, 2011.
- [55] M. E. Fisher, S.-k. Ma, and B. Nickel, “Critical exponents for long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 29, no. 14, p. 917, 1972.
- [56] P. W. Anderson, “The question of classical localization a theory of white paint?,” *Philosophical Magazine B*, vol. 52, no. 3, pp. 505–509, 1985.
- [57] L. Fleishman and P. Anderson, “Interactions and the Anderson transition,” *Physical Review B*, vol. 21, no. 6, p. 2366, 1980.
- [58] I. De Oliveira, F. de Moura, M. Lyra, J. Andrade Jr, and E. Albuquerque, “Bose-Einstein condensation in the Apollonian complex network,” *Physical Review E*, vol. 81, no. 3, p. 030104, 2010.
- [59] E. P. Borges and C. Tsallis, “Negative specific heat in a Lennard-Jones-like gas with long-range interactions,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 305, no. 1-2, pp. 148–151, 2002.
- [60] D. Ruelle, *Statistical mechanics: Rigorous results*. World Scientific, 1999.
- [61] E. Schrödinger, *Statistical thermodynamics*. Courier Corporation, 1989.

- [62] A. Campa, T. Dauxois, D. Fanelli, and S. Ruffo, *Physics of long-range interacting systems*. OUP Oxford, 2014.
- [63] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, “Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions,” *Physics Reports*, vol. 480, no. 3-6, pp. 57–159, 2009.
- [64] P. Lugan, D. Clément, P. Bouyer, A. Aspect, M. Lewenstein, and L. Sanchez-Palencia, “Ultracold Bose gases in 1D disorder: From Lifshits glass to Bose-Einstein condensate,” *Physical Review Letters*, vol. 98, no. 17, p. 170403, 2007.
- [65] I. de Oliveira, F. de Moura, R. Caetano, and M. Lyra, “Suppression of Bose-Einstein condensation in one-dimensional scale-free random potentials,” *Physical Review B*, vol. 82, no. 17, p. 172201, 2010.
- [66] J. Luttinger and H. Sy, “Bose-Einstein Condensation in a One-Dimensional Model with Random Impurities,” *Physical Review A*, vol. 7, no. 2, p. 712, 1973.
- [67] M. Tezuka, A. M. García-García, and M. A. Cazalilla, “Destruction of long-range order by quenching of the hopping range in one dimension,” *Physical Review A*, vol. 90, no. 5, p. 053618, 2014.
- [68] H.-Y. Chen, S.-Q. Liu, and X.-Q. Li, “Modulation instability by intense laser beam in magnetized plasma,” *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, vol. 122, no. 7, pp. 599–603, 2011.
- [69] N. Sepehri Javan, “Modulation instability of an intense laser beam in the hot magnetized electron-positron plasma in the quasi-neutral limit,” *Physics of Plasmas*, vol. 19, no. 12, p. 122107, 2012.
- [70] M. Hoefler, J. Chang, C. Hamner, and P. Engels, “Dark-dark solitons and modulational instability in miscible two-component Bose-Einstein condensates,” *Physical Review A*, vol. 84, no. 4, p. 041605, 2011.
- [71] R. S. Tasgal and Y. Band, “Sound waves and modulational instabilities on continuous-wave solutions in spinor Bose-Einstein condensates,” *Physical Review A*, vol. 91, no. 1, p. 013615, 2015.

- [72] G.-Q. Li, G.-D. Chen, P. Peng, Z. Li, and X.-D. Bai, “Modulation instability of a spin-1 Bose-Einstein condensate with spin-orbit coupling,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 50, no. 23, p. 235302, 2017.
- [73] M. Inc, A. I. Aliyu, A. Yusuf, and D. Baleanu, “Optical solitons and modulation instability analysis of an integrable model of (2+ 1)-dimensional Heisenberg ferromagnetic spin chain equation,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 112, pp. 628–638, 2017.
- [74] M. Stepić, A. Maluckov, M. Stojanović, F. Chen, and D. Kip, “Modulational instability and solitary waves in one-dimensional lattices with intensity-resonant nonlinearity,” *Physical Review A*, vol. 78, no. 4, p. 043819, 2008.
- [75] B. K. Shivamoggi, “Relativistic modulational instability of an electromagnetic wave in a magnetized plasma,” *Physical Review A*, vol. 31, no. 3, p. 1728, 1985.
- [76] A. Hasegawa and F. Tappert, “Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. i. anomalous dispersion,” *Applied Physics Letters*, vol. 23, no. 3, pp. 142–144, 1973.
- [77] A. Hasegawa and F. Tappert, “Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. ii. normal dispersion,” *Applied Physics Letters*, vol. 23, no. 4, pp. 171–172, 1973.
- [78] I. A. S. Júnior, “Dissertação de mestrado: Análise do efeito mistura de quatro ondas em fibras ópticas na janela de 1550 nm,” *Instituto Nacional de Telecomunicações*, 2004.
- [79] G. Da Silva, I. Gleria, M. Lyra, and A. Sombra, “Modulational instability in lossless fibers with saturable delayed nonlinear response,” *JOSA B*, vol. 26, no. 1, pp. 183–188, 2009.
- [80] G. da Silva, T. Lobo, and A. Canabarro, “Stochastic noise amplification in noninstantaneous Kerr media,” *JOSA B*, vol. 31, no. 9, pp. 2012–2020, 2014.
- [81] V. L. Chaves Filho, R. P. Lima, F. de Moura, and M. L. Lyra, “Stability of uniform electronic wavepackets in chains and fullerenes,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. 26, no. 12, p. 1550133, 2015.

-
- [82] G. Gori, T. Macrì, and A. Trombettoni, “Modulational instabilities in lattices with power-law hoppings and interactions,” *Physical Review E*, vol. 87, no. 3, p. 032905, 2013.
- [83] W. Qi, Z.-H. Li, J.-T. Cai, G.-Q. Li, and H.-F. Li, “Modulational instability and localized breather in discrete Schrödinger equation with helicoidal hopping and a power-law nonlinearity,” *Physics Letters A*, vol. 382, no. 27, pp. 1778–1786, 2018.
- [84] J. Wyller, W. Krolikowski, O. Bang, and J. J. Rasmussen, “Generic features of modulational instability in nonlocal Kerr media,” *Physical Review E*, vol. 66, no. 6, p. 066615, 2002.
- [85] W. Z. Krolikowski, B. Esbensen, A. Wlotzka, O. Bang, and M. Bache, “Modulational instability and solitons in nonlocal media with competing nonlinearities,” in *Nonlinear Photonics*, pp. NW3D–4, Optical Society of America, 2012.