

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

Leônade Daviliano da Silva

Transporte de carga e modos vibracionais em sistemas
desordenados de baixa dimensionalidade: potenciais harmônicos
e não-lineares, interação elétron-fônon e efeitos de pulsos
acústicos externos

Maceió
2018

Leônade Daviliano da Silva

Transporte de carga e modos vibracionais em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade: potenciais harmônicos e não-lineares, interação elétron-fônon e efeitos de pulsos acústicos externos

Tese apresentada ao programa de pós-graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, como parte dos requisitos para obter o título de doutor em física.

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

**Maceió
2018**

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecário: Marcelino de Carvalho

- S586t Silva, Leônade Daviliano da.
Transporte de carga e modos vibracionais em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade : potenciais harmônicos e não-lineares, interação elétron-fônon e efeitos de pulsos acústicos externos / Leônade Daviliano da Silva. – 2019. 87. : il.
- Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Tese (doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2018.
- Bibliografia: f. 82-86.
Apêndices: f. 87.
1. Espalhamento (Física). 2. Dinâmica de pacotes de ondas. 3. Schrödinger, Equação de. 4. Interação elétron-fônon. I. Título.

CDU: 531.772



PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
TESE DE DOUTORADO

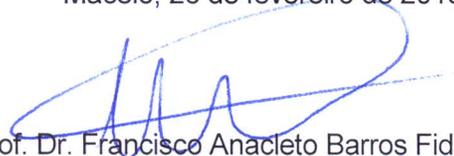
“Transporte de carga e modos vibracionais em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade: potenciais harmônicos e não-lineares, interação elétron-fônon e efeitos de pulsos acústicos externos”

por

Leônade Daviliano da Silva

A Banca Examinadora composta pelos professores Franciso Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Iram Marcelo Gléria, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Alexandre Manoel de Moraes Carvalho, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Samuel Silva de Albuquerque, da Universidade Federal de Alagoas - Campus Arapiraca, e Carlos Argolo Pereira Alves, do Instituto Federal de Alagoas,, consideram o candidato **aprovado com grau “A”**.

Maceió, 26 de fevereiro de 2018


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Iram Marcelo Gléria


Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes Carvalho


Prof. Dr. Samuel Silva de Albuquerque


Prof. Dr. Carlos Argolo Pereira Alves

DEDICATÓRIA

Dedico ao ex-presidente Luiz Inácio Lula da Silva

AGRADECIMENTOS

- A todos os meus parentes e familiares, em especial meu querido pai Juvenal Daviliano da Silva, minha querida mãe Cícera Maria de Jesus Silva, minha irmã Leandra Dayane da Silva, Minha linda sobrinha Láysa Mayane da Silva, ao meu filho de coração Lucas Emanuel Ferreira de Lima, a minha filha Késia Kauane Daviliano da Silva e minha querida esposa Keiliane Maria da Silva. Sou muito grato a todos por tudo que sou hoje;

- A todos os meus amigos do IF-UFAL, em especial Juarez Gomes da Silva, José Fábio dos Santos Assunção, Jefferson Ferreira da Silva, José Leandro Lúcio dos Santos e Anthony Sales Peixoto, José Gonzales Firmino;

- A todos os professores do IF-UFAL, devo a vocês minha formação;

- A todos os integrantes do grupo de pesquisa **Grupo de Propriedades de Transporte em Sistemas de Baixa Dimensionalidade(GPTSBD)** do qual faço parte;

- Ao meu orientador, professor e eterno grande mestre Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura(Prof. Fidelis). Este vem me ensinado a viver. Muita admiração e respeito a você Mestre, Oss!

- Em meio ao nosso momento histórico atual, poderei naturalmente fazer uma analogia do Grupo (GPTSBD) com o “grupo de Alexandria”, fazendo uma alusão ao seriado de “TV” *The Walking Dead*. Na verdade, essa analogia é oriunda da ideia de permanecermos vivos com nossas esperanças, mesmo com tantas e tantas dificuldades que surgem em diversas frentes, e principalmente advindas da conjuntura política atual. Somos orientados diariamente, sobre qualquer hipótese, a não “baixar a guarda” e estar sempre preparados para um confronto direto. Dessa forma, nada mais justo do que comparar o Prof. Fidelis, líder do nosso grupo, a “Rick Grimes”, líder de Alexandria. Rick é um exército de um homem só e seu único objetivo é lutar diariamente pela auto sobrevivência, sobrevivência do seu grupo e por um mundo melhor para todos. Além do conhecimento acadêmico adquirido durante todo esse tempo dedicado ao Instituto de Física-UFAL, levarei por toda minha vida a garra para sobreviver nesse “Apocalipse Zumbi”.

- Preciso agradecer ao ex-presidente *Luiz Inácio Lula da Silva* e a ex-presidente *Dilma Vana Rousseff* pelos programas sociais de inclusão de jovens pebres e desfavorecidos na universidade, o quel faço parte, e pelos investimentos feitos na universidade durante seu

tempo de governo, algo nunca visto na história deste país. Gratidão!

Resumo

Neste trabalho, inicialmente investigamos a dinâmica eletrônica em uma cadeia de Fermi, Pasta, Ulam desordenada considerando interação elétron-fônon e a presença de um pulso acústico gaussiano. Consideramos a dinâmica do elétron usando o formalismo da Mecânica Quântica e para as vibrações atômicas não-lineares da rede usamos o formalismo da Física Clássica. Estudamos numericamente a propagação eletrônica através da solução numérica das equações quânticas/clássicas acopladas. Nossos cálculos sugerem que o bombeamento acústico associado à interação elétron-rede promove uma dinâmica eletrônica sub-difusiva. Concluindo essa primeira etapa, analisamos o transporte de energia vibracional em uma rede harmônica com desordem diluída. Em nosso modelo, a distribuição das massas é uma superposição de duas sub-redes, uma aleatória e outra periódica. As equações clássicas para o deslocamento em massa e as velocidades são resolvidas usando um formalismo de Euler de segunda ordem. O fluxo de energia foi investigado através de dois tipos de experimentos: i) Injetamos um pacote de energia em torno do centro da rede e analisamos a dinâmica deste pacote; ii) bombeamos um dos lados da rede com um sinal externo e então observamos a propagação deste pulso até o outro lado da rede. Nossos cálculos sugerem que a distribuição de massa desordenada diluída promove a propagação da energia vibracional inclusive na região com frequências não nulas.

Palavras-chave: Espalhamento sub-difusivo, dinâmica de pacotes de ondas, equação de Schrödinger.

Abstract

In this work we initial investigate the electronic dynamics in a disordered Fermi, Pasta, Ulam model under the presence of electron-phonon interaction and also a pumping of Gaussian acoustic pulses. We considered the electronic dynamics by using a quantum mechanics formalism and the nonlinear atomic vibrations by using standard classical physics. We study numerically the electronic propagation by numerical solution of the coupled quantum/classical equations. Our calculations suggest that the acoustic pumping associated with the electron-lattice interaction promotes a sub-diffusive electronic dynamics. Concluding this first work, we studied the problem of a two-dimensional harmonic lattice in which the masses distribution is a superposition of a random and a periodic distribution. Classical equations for the mass displacement and velocities are solved using a second order Euler formalism. Energy flow was investigated on two distinct experiments: i) We injected an initial wave-packet with energy E_0 and analyzed the dynamics of the resulting energy pulse; ii) we pumped one of the sides of the lattice with a external signal and then we observed the propagation of the pulse until the other side of chain. Our calculations suggest that the diluted disordered mass distribution promotes energy dynamics at high frequency limit.

Keywords: sub-diffusive spreading, wave packet dynamcis, nonlinear Schrödinger equation.

Sumário

1	TRANSPORTE ELETRÔNICO, DESORDEM E INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON	11
1.1	Introdução	11
1.2	O Teorema de Bloch	15
1.3	Modelo de Anderson	19
1.4	Teoria de escala para a transição de Anderson	26
1.5	Interação elétron-fônon	31
1.6	Redes Anarmônicas: Potenciais tipo Fermi-Pasta-Ulam	41
1.7	Interação do elétron com um pulso acústico	43
2	TRANSPORTE ELETRÔNICO EM CADEIAS DESORDENADAS NÃO-LINEARES NA PRESENÇA DE MODOS ACÚSTICOS.	47
2.1	Introdução	47
2.2	Modelo e Formalismo	49
2.3	Resultados e Discussões	55
3	MODOS DE VIBRAÇÃO EM REDES HARMÔNICAS BIDIMENSIONAIS	63
3.1	Introdução	63
3.2	Modelo e Formalismo	66
3.2.1	Resultados e Discussões	72
4	CONCLUSÃO	79
	REFERÊNCIAS	82
	APÊNDICE A –	87

Lista de Figuras

FIGURA 1.1 – Rede sem desordem e rede desordenada. Na figura da esquerda temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional de um cristal perfeito. Na figura da direita temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional com a implementação de lacunas na rede, distorções e diferentes átomos.	16
FIGURA 1.2 – Representação esquemática de um potencial periódico $U(\vec{r})$ para um sólido cristalino em uma dimensão.	17
FIGURA 1.3 – A figura traz uma representação esquemática do potencial cristalino como uma superposição de potenciais atômicos localizados nos sítios da rede t_n . Na aproximação tight-binding, a interação entre os orbitais atômicos vizinhos Ψ_a de energia E_a leva a formação das bandas de energia.	19
FIGURA 1.4 – A) Representação esquemática de uma rede unidimensional com desordem. A desordem é representada aqui por bolinhas de tamanhos e texturas diferentes. B) Representação de uma rede unidimensional sem desordem, ou seja, o modelo de Bloch unidimensional.	20
FIGURA 1.5 – Representação da transição de Anderson no modelo tight-binding. A função de onda eletrônica tem localização induzida por desordem quando a faixa de desordem W é maior que a largura de banda de energia B	24
FIGURA 1.6 – A figura traz uma ilustração de estados estendidos e estados localizados. Em (a), temos uma representação de estado estendidos da função de onda eletrônica. Em (b), mostramos uma ilustração para função de ondas exponencialmente localizada devido a presença de desordem no material.	25
FIGURA 1.7 – Representação qualitativa do comportamento da função de escala $\beta(g)$ em relação as dimensões $d = 1, 2$ e 3 perante a teoria de escala mostrada por (Abrahams et al., 1979).	29
FIGURA 1.8 – Representação qualitativa do comportamento da função $\beta(g)$ em função da condutância g em termos das dimensões $d = 1, 2$ e 3	30

- FIGURA 1.9 – Representação esquemática de uma rede unidimensional com um conjunto de átomos desordenados acoplados por molas. 32
- FIGURA 2.1 – Na figura (2.1) encontramos resultados referente ao Centroide $\langle n \rangle$ versus o Tempo t (a-b), Desvio Médio Quadrático $\sigma(t)$ versus o Tempo t (c-d) e Entropia de Shannon $S(t)$ versus o $Ln(t)$ (e-f). Para isso usamos $W = 2$, $\omega = 0.4, 0.8$, $\eta = 0, 2$ e $\alpha = 0.0, 0.1, 0.2, 0.4$ 57
- FIGURA 2.2 – Na figura (2.2) Encontramos resultados referente ao módulo quadrado da função de onda $|c_n(t)|^2$ versus o tamanho da cadeia n versus o tempo t . Para isso usamos $W = 2$, $\eta = 0.2$, $\alpha = 0.4$ e $\alpha = 0.2$ (a) e $\alpha = 0.4$ (b). Observamos que a presença de interação elétron-rede promove a propagação da função de onda eletrônica. 59
- FIGURA 2.3 – Na figura (2.3)(a) Encontramos resultados referente a Probabilidade Generalizada da Deformação Local c_n versus n e t para uma cadeia com $W = 2$, $\eta = 0, 2$, $\alpha = 0, 2$ e $\omega = 0, 4$. Para a figura (2.3)(b) podemos encontra os resultados referente a $\langle n_v \rangle$ e σ_v 60
- FIGURA 2.4 – Na figura (2.4)(a) Encontramos resultados referente a Posição Média $\langle n \rangle$ em função de t para $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$ e $\eta = 0.0, 0.4, 0.8$. Na figura (2.4)(a) os resultados são referentes a $S(t)$ versus $ln(t)$ para $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$ e $\eta = 0.0, 0.4, 0.8$. 62
- FIGURA 3.1 – A figura A) Representa uma estrutura atômica bidimensional estática de tamanho $N \times N$, onde cada sítio (i, j) tem uma massa $m_{i,j}$. B) É semelhante a figura A), sendo que a massa central é deslocada de sua posição de equilíbrio. Em nossa abordagem este tipo de condição mostrada na figura (B) representa a condição inicial tipo “deslocamento”. Ou seja, deslocar a rede conforme a figura (B) acaba injetando uma energia E_0 na rede. Outra forma de injetar energia na rede se chama “injeção por impulso”; nesta modalidade a rede permanece seguindo o padrão da figura (A) sendo que a massa central (apenas ela) recebe uma certa velocidade num tempo inicial t_0 66

FIGURA 3.2 – A figura representa a dispersão de Energia vibracional $\Sigma(t)$ versus o Tempo t . Em A), temos informação da excitação por impulso, que corresponde a $v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = \delta_{i,i_c} \delta_{j,j_c}$ e $x_{i,j}(t=0) = j$ e $y_{i,j}(t=0) = i$. Em B), temos informação da excitação por deslocamento que corresponde a $x_{i,j}(t=0) = j + \delta$ e $y_{i,j}(t=0) = i + \delta$ e $v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = 0$. Para o caso desordenado (i_c, j_c) foi escolhido como sendo o centro da rede. Para os casos com desordem diluída (i_c, j_c) foi escolhido como sendo um sítio em torno do centro da rede com massa $m_{i_c, j_c} = 1$. Em nossos cálculos consideramos $\delta = 0.1$. Nós observamos que, para o caso aleatório, a propagação da energia mostrou uma dinâmica superdifusiva, o que é observado com $(\Sigma(t) \propto t^{3/4})$, o que por sua vez, é observado na figura (3.2) A). Já na figura (3.2) B), observamos uma dinâmica difusiva, que é caracterizado por $(\Sigma(t) \propto \sqrt{t})$. Além disso, independente do tipo de condição inicial nossos resultados indicam que a desordem diluído promove uma dinâmica balística $\Sigma(t) \propto t^1$ 75

FIGURA 3.3 – A figura representa o Deslocamento de Massa D_{i_0, d_0} versus o Tempo t e a transformada de Fourier, $I(\omega)$ versus ω . A) D_{i_0, d_0} versus t para o caso aleatório e para ambos os tipos de desordem diluída. Os cálculos foram feitos em uma rede harmônica retangular (LxN) com $N = 1500$ e $L = 360$. Em nossos cálculos $i_0 \approx L/2$, $d_0 \approx 1200$. Enfatizamos que consideramos $t = 0$ o tempo em que $|D_{i_0, d_0}| > 10^{-10}$. B) $I(\omega)$ versus ω , com $I(\omega) = |FT(D_{i_0, d_0}(t))|$, onde $FT(D_{i_0, d_0}(t))$ representa a transformada de Fourier para os dados vistos em (A). Para os casos aleatórios, a função $I(\omega)$ é praticamente nula para $\omega > 0$ e apresenta um crescimento para $\omega \approx 0$. Para ambos os tipos de desordem diluída, $I(\omega)$ exibe um platô que sugere a existência de uma banda de modos vibracionais estendidos. 76

FIGURA 3.4 – A figura representa a dispersão da energia vibracional $\Sigma(t)$ versus o tempo t . Considerando a energia inicial colocada em um sítio i_c, j_c pertencente a subestrutura aleatória (isto é, o site inicial (i_c, j_c) é um site próximo ao centro da cadeia com $m_{i_c, j_c} \neq 1$). Os cálculos foram feitos para A) excitação de impulso e B) excitação por deslocamento. 77

1 Transporte eletrônico, desordem e interação elétron-fônon

1.1 Introdução

Durante muito séculos as propriedades físicas dos sólidos vêm despertando grande interesse na comunidade científica mundial. No início do século XX, a chamada “física do estado sólido” teve um grande avanço no entendimento de diversas propriedades físicas tais como condução elétrica e térmica ([Drude, 1900a](#); [Sommerfeld, 1927](#); [Bloch, 1928](#)). Em linhas gerais, podemos separar estes estudos em uma fase clássica e semi-clássica (aproximadamente de 1900 até 1928) e, finalmente, uma fase “quântica” que teria início após 1928. No período quântico, destaca-se o trabalho de Bloch que usou princípios da mecânica quântica para entender propriedades físicas dos metais. De maneira geral, o trabalho de Bloch e demais autores da época proporcionaram um entendimento inicial sobre o comportamento condutor, semi-condutor e isolante para diversos sólidos ([Bassalo, 1993](#)). Dentro desse contexto, faremos uma breve introdução histórica visando entender aspectos referentes ao transporte eletrônico a luz dos modelos de condução pertencentes a esse momento da física do estado sólido do início do século XX. Assim, visitaremos alguns modelos de fundamental importância como o Modelo de Drude, Modelo de Bloch e também modelos mais modernos envolvendo termos de interação Coulombiana e/ou elétron-rede. Por fim, será apresentada nossa contribuição na literatura a respeito de teorias de localização eletrônica em sistemas de baixa dimensionalidade.

A descoberta do elétron por Joseph John Thomson (1856 – 1940) em 1897 ([Thomson, 1987](#)) foi um ponto crucial para toda essa abordagem. Após essa descoberta, o físico alemão Paul Drude (1863 – 1906) ([Drude, 1900a](#); [Drude, 1900b](#)) propôs um modelo em que os sólidos metálicos fossem formados por íons positivos em posições fixas e os elétrons pudessem mover-se livremente por todo o sólido. Nesse modelo, os elétrons não interagem com os íons, então o sistema se comporta como um gás de elétrons livre. O modelo de Drude é considerado simples e obviamente falhou em alguns aspectos, como por exemplo, na distinção entre condutores e isolantes. Entretanto, este modelo pôde explicar propriedades importantes para os sólidos, como a lei de Ohm, por exemplo. Em 1927, com o desenvolvimento da teoria quântica, o físico teórico e também alemão, Arnold Sommerfeld ([Sommerfeld, 1927](#)) (1868 – 1951) trabalhou com a mesma hipótese de Drude, entretanto, foi capaz de acrescentar aspectos quânticos da matéria ao modelo de Drude, mas este modelo também não foi capaz de descrever a distinção entre metal e isolante. No ano seguinte, o importante físico suíço e ganhador do Prêmio Nobel da física em 1952, Felix Bloch (1905 – 1983), propôs um modelo no qual os elétrons se moviam sob a ação de um potencial periódico ([Bloch, 1928](#)). Essa abordagem teve como objetivo estudar propriedades elétricas em uma estrutura cristalina perfeita. Bloch também introduziu o conceito de banda de energia, desta forma, foi possível fazer uma distinção entre metal e isolante.

O físico Philip Warren Anderson nascido nos Estados Unidos em 1923, dentre outras conquistas, recebeu o Nobel de Física de 1977, por estudos teóricos sobre propriedades de transporte em sistemas desordenados. Em 1958, ele propôs um modelo capaz de estudar efeitos de desordem sobre o transporte eletrônico ([Anderson, 1958](#)). Neste trabalho, Anderson toma como base a modelagem (tight-binding), ver figura (1.5), e assim foi possível definir o conceito de localização eletrônica na presença de desordem. Anderson mostrou que a função de onda do elétron sofre diversas reflexões no potencial aleatório(desordem), e assim, acontecem diversas interferências destrutivas que acabam localizando a função de onda em uma região finita do material(esteste fenômeno é chamado de localização eletrônica devido a desordem ou também chamado de “localização de Anderson”). Anderson tam-

bém mostrou a possibilidade de uma transição de fase entre estados localizados (estados isolantes) e estados “não localizados” (ou também chamados de “estados estendidos” ou estados metálicos). Esta transição ficou conhecida na literatura como transição de Anderson. No entanto, neste trabalho de 1958, Anderson não fez um estudo explícito sobre a dependência desta transição de fases com a dimensionalidade do sistema. Foi aí que em 1979, em colaboração com Abrahams, Licciardello e Ramakrishnan ([Abrahams et al., 1979](#)), foi elaborada uma teoria de escala e assim a dependência com a dimensionalidade foi então obtida. Eles mostraram que efeitos de localização da função de onda eletrônica são muito mais intensos em baixas dimensões ($d \leq 2$). A teoria de escala nos diz que para $d \leq 2$ todos os estados são localizados mesmo no limite de desordem fraca, caracterizando assim, um comportamento isolante. No limite de $d > 2$ e no regime de desordem fraca a transição de Anderson foi observada.

Na aproximação usada por Anderson, a mobilidade dos átomos da rede não foi considerada. Em linhas gerais, Anderson trabalhou dentro da aproximação de Born-Oppenheimer, ou seja, os átomos estão parados. Entretanto neste trabalho é de suma importância entender a dinâmica de um elétron em uma rede atômica que apresente modos normais de vibração. Este tema foi recorrente na literatura nas últimas décadas ([da Silva, 2016](#); [Asada et al., 2004](#); [Velarde, 2010](#); [de Moura, 2013](#); [Davydov., 1977](#); [Davydov, 1979](#); [Davydov, 1981](#); [Davydov, 1983](#); [SU-Schrieffer-Heeger., 1979](#); [da Silva, 2014](#); [Albuquerque et al., 2005](#); [Wegner, 1976](#); [Díaz; Rodríguez; Domínguez; Malyshev, 2005](#)). Uma das contribuições relevantes neste tema foi apresentado por Su-Schrieffer-Heeger em (1979), também chamado na literatura de aproximação SSH ([SU-Schrieffer-Heeger., 1979](#)). Neste trabalho o transporte de carga em polímeros foi investigado considerando que a energia cinética eletrônica entre átomos vizinhos depende da distância média entre estes átomos. Portanto, nesta abordagem, o chamado “termo de hopping” do elétron acaba dependendo da posição atômica; por sua vez, a posição dos átomos da rede foi regida por um modelo harmônico padrão. Assim, o chamado modelo SSH (ou aproximação SSH) nada mais é que um modelo de 1(um) elétron na presença de uma interação elétron-rede efetiva (também chamada de interação elétron-fônon).

Em se tratando de trabalhos que envolvem redes não-lineares, o experimento numérico proposto pelo grande físico italiano Enrico Fermi (1901 – 1954), o americano John Pasta (1918 – 1984) e o ucraniano Stanislaw Ulam (1909 – 1984) (Fermi, 1955) tem papel importante dentro da história da simulação computacional. Esse trabalho é precursor de vários outros experimentos e aplicações teóricas (de Moura, 2013; da Silva, 2017). Fermi, Pasta e Ulan (FPU) estudaram aspectos vibracionais em uma rede não-linear com o objetivo de entender o transporte de calor e o perfil de temperatura da amostra. O modelo proposto por FPU se trata de uma cadeia unidimensional onde os átomos vizinhos são acoplados por forças não lineares (quadrático ou cúbico).

Os trabalhos acima relacionados foram conduzidos, em linhas gerais, de forma independente. Ou seja, foram feitos diversos estudos sobre a natureza de estados eletrônicos em sistemas desordenados com dimensão $d = 1, 2$ e 3 (Eilmes., 2005; Santos et al, 2006; Albuquerque et al., 2006; Fermi, 1955; Asada et al., 2004), bem como diversos estudos sobre propriedades de transporte de energia vibracional em sistemas lineares ou não lineares. Entretanto, a competição entre desordem e vibração atômica dentro do contexto de transporte eletrônico é um tema que merece uma investigação mais detalhada. Para se construir uma teoria contendo transporte de cargas e a vibração atômica é necessário recorrer ao conceito de interação elétron-fônon (mesmo que se use um formalismo efetivo de interação elétron-fônon (Neto, 2016)). Dentro deste contexto é que este trabalho se encaixa. Apresentaremos um estudo sobre a dinâmica de um elétron movendo-se em uma cadeia desordenada com potencial do tipo Fermi, Pasta, Ulam sob efeito da interação elétron-fônon com Bombeamento do pulso acústico gaussiano. Para tanto, a dinâmica do elétron foi descrita usando o formalismo da mecânica quântica e para as vibrações da rede usamos o formalismo presente na física clássica. Estudamos numericamente a propagação da onda eletrônica na cadeia com o acoplamento das equações quântica/clássica. Nossos resultados sugerem que o bombeamento através de pulso acústico gaussiano associado a esta estrutura eletrônica promove uma dinâmica eletrônica sub-difusiva.

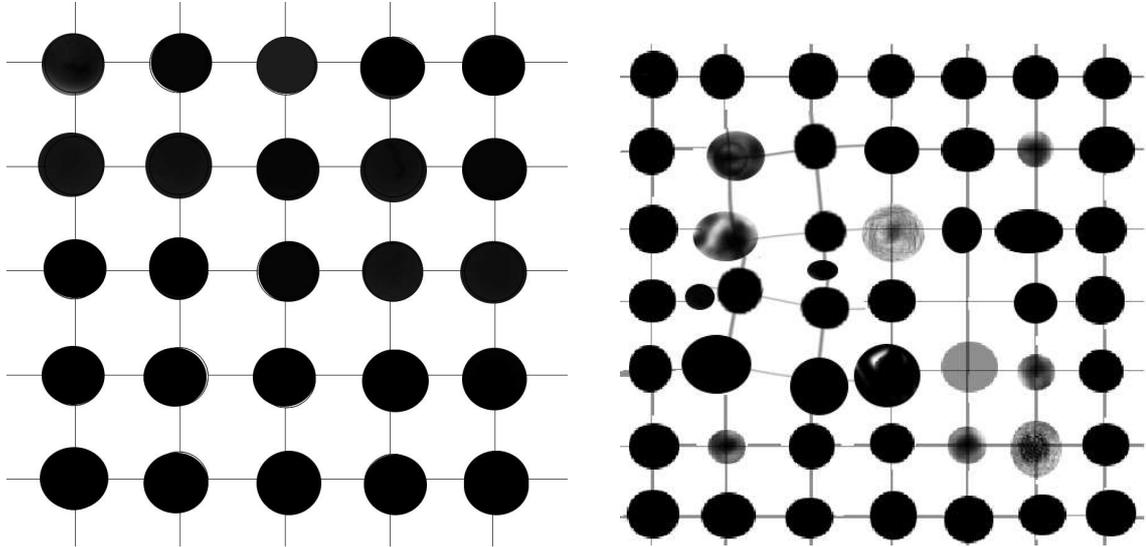
Em seguida, iniciamos um estudo referente à dinâmica de uma rede bidimensional atômica desordenada. Em nosso modelo, temos uma cadeia harmônica, bidimensional em

que as massas dos átomos são desordenadas. Consideramos assim, uma desordem diluída. Aqui, as massas são acopladas com as massas vizinhas através de molas simples, ou seja, vale a lei de Hooke. A desordem diluída é composta por duas sub-redes interpenetrantes, uma composta por massas aleatórias e outras por massas periódicas. Dessa forma, analisamos a propagação de energia ao longo da rede considerando duas condições: i) Injetamos inicialmente um pacote de onda com de energia E_o , então observamos a dinâmica do pulso de energia ao longo da rede; ii) Bombeamos um dos lados da rede e analisamos a propagação desse pulso até atingir o outro lado da rede. Enfatizamos que nosso estudo consiste em resolver equações clássicas para deslocamentos e velocidades das massas. Com os resultados encontramos evidências de que correlações intrínsecas existentes dentro da distribuição de massa diluída desempenham um papel relevante na propagação de energia. Nossos cálculos também ajudaram a prever a região de frequência que se propaga ao longo da rede.

1.2 O Teorema de Bloch

Nesta seção, iremos fazer uma breve revisão sobre o Modelo de Bloch. Esse modelo descreve os estados eletrônicos em um estrutura teórica que representa um cristal. Em linhas gerais, temos um elétron se movendo em um potencial periódico. No lado esquerdo da figura (1.1) podemos observar uma representação esquemática de um estrutura cristalina perfeita, onde as bolinhas escuras com mesmas dimensões representam um conjunto de átomos ou moléculas da rede com mesmo potencial e espaçamentos regulares. Na abordagem de Bloch (Bloch, 1928; da Silva, 2014; Kittel, 2005), a energia de interação entre os elétrons é muito menor que a energia de interação entre os elétrons com os íons da rede, dessa forma, consideraremos interação do elétron apenas com os íons da rede que, por sua vez, é representado por um potencial de interação $U(\mathbf{r})$, onde \mathbf{r} indica a posição do elétron no material. O fato dos íons ocuparem posições regulares implica em uma periodicidade espacial do potencial $U(\mathbf{r})$, ver a figura (1.2), onde \mathbf{R} é um vetor da rede cristalina. Portanto, o potencial terá a seguinte propriedade:

FIGURA 1.1 – Rede sem desordem e rede desordenada. Na figura da esquerda temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional de um cristal perfeito. Na figura da direita temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional com a implementação de lacunas na rede, distorções e diferentes átomos.



Fonte: da Silva, L. D. (da Silva, 2014)

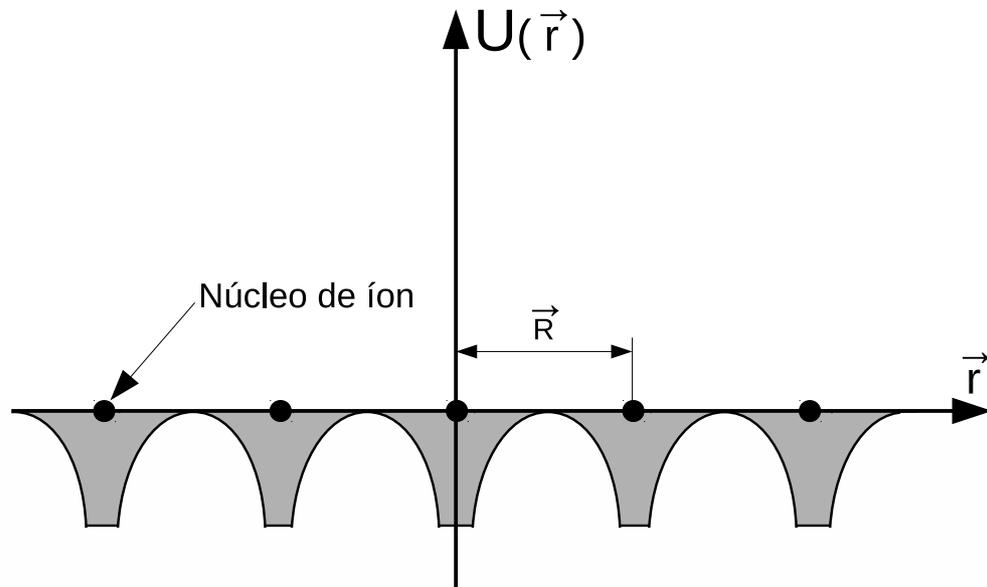
$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.1)$$

Como bem sabemos, nesse problema não levamos em consideração a interação elétron-elétron. Então, os autoestados de um elétron que move-se em um cristal são dados pela equação de Schrödinger, como segue abaixo:

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\mathbf{r})\psi\right] = E\psi. \quad (1.2)$$

Nesse sentido, enunciaremos agora um dos resultados mais importantes dentro da física da matéria condensada, que nos fornece a forma das solução da equação (1.2), o Teorema de Bloch.

FIGURA 1.2 – Representação esquemática de um potencial periódico $U(\vec{r})$ para um sólido cristalino em uma dimensão.



Fonte: C. Kittel, 2005 (Kittel, 2005)

Devido a periodicidade da rede, equação (1.2), ao substituímos $\mathbf{R} + \mathbf{r}$ por \mathbf{r} a equação permanece inalterada nos operadores que atuam sobre ψ . Portanto, o Teorema de Bloch mostra que as soluções para a equação de Schrödinger devem ser:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (1.3)$$

Nessa equação temos $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ que representa os autoestados, $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a função periódica ou a chamada função de Bloch e $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ indica uma onda plana. Com a substituição de $\mathbf{R} + \mathbf{r}$ por \mathbf{r} temos:

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.4)$$

Dessa forma, $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tem a periodicidade da rede, o subscrito \mathbf{k} indica que a função de onda $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ depende do vetor \mathbf{k} , e por fim, \mathbf{n} representa as múltiplas soluções da equação de Schrödinger para um vetor de onda \mathbf{k} . Combinando as equações (1.3) e (1.4), temos,

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.5)$$

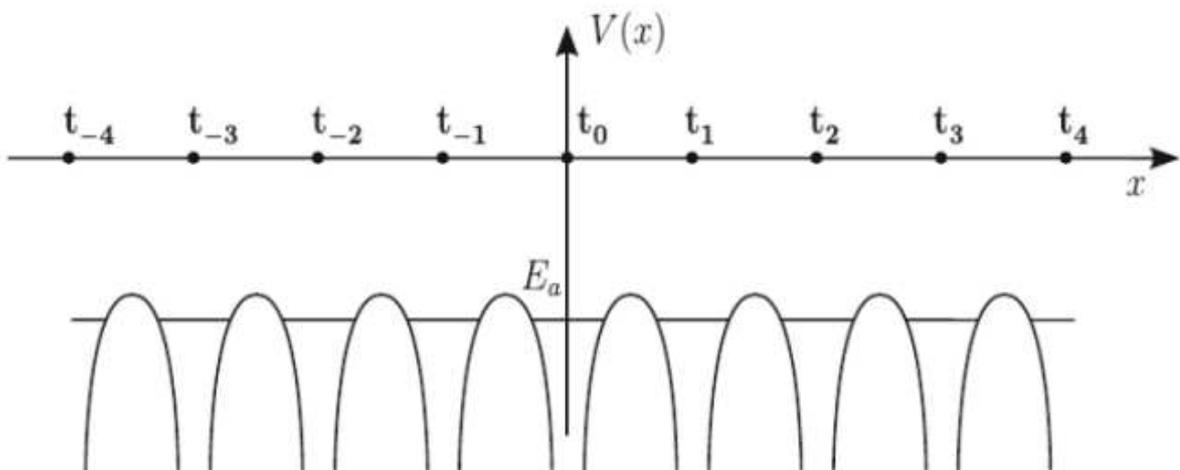
Portanto, a equação (1.5) é conhecida como Teorema de Bloch. Sem dúvidas, o modelo de Bloch tem fundamental importância no desenvolvimento da física do século XX. Podemos destacar fatores que foram compreendidos a partir do deste Teorema; o fato de que quando o elétron está contido em uma rede periódica e interage apenas com os íons da rede a função de onda do elétron se estende por todo o sistema. Outro fato importante que foi explicado em sistemas cristalino, foi a diferença entre condutores, isolantes e semicondutores. Entretanto, na natureza boa parte dos sistemas reais não são cristalinos, em geral exibem defeitos ou total ausência de quaisquer simetrias ou periodicidades. Desta forma, vem a necessidade de estudar a presença de desordem nos sistemas (Dos Santos, 2007; Anderson, 1958). Para entender a definição de desordem considere novamente a figura (1.1). O lado esquerdo representa um sistema atômico cristalino. O lado direito desta figura mostra uma estrutura atômica com lacunas na rede, distorção, impurezas e/ou íons distintos. Esta completa ausência de simetrias espaciais na estrutura atômica é geralmente chamada de “desordenado”. Enquanto que um material cristalino

tem uma estrutura atômica com periodicidade espacial, um material desordenado tem estrutura atômica interna sem periodicidades. Portanto, a periodicidade que foi imposta no potencial de Bloch é violada em um sistema desordenado. Dentro desse contexto, se faz necessário agora apresentar o formalismo de Anderson que foi proposto em 1958, o mesmo permite entender a natureza dos autoestados eletrônicos em sistemas desordenados.

1.3 Modelo de Anderson

Seguindo a linha cronológica, em 1958, Anderson propôs um modelo em que podem ser considerado os efeitos da desordem sobre o transporte eletrônico. Esse modelo definiu o importante conceito de localização eletrônica na presença de desordem. Assim, Anderson mostrou que a função de onda eletrônica sofre diversas reflexões no potencial aleatório e dessa forma acontecem interferências destrutivas que localizam a função de onda em uma região finita do material (Moura, 2003; Dias, 2011; Anderson, 1958).

FIGURA 1.3 – A figura traz uma representação esquemática do potencial cristalino como uma superposição de potenciais atômicos localizados nos sítios da rede t_n . Na aproximação tight-binding, a interação entre os orbitais atômicos vizinhos Ψ_a de energia E_a leva a formação das bandas de energia.

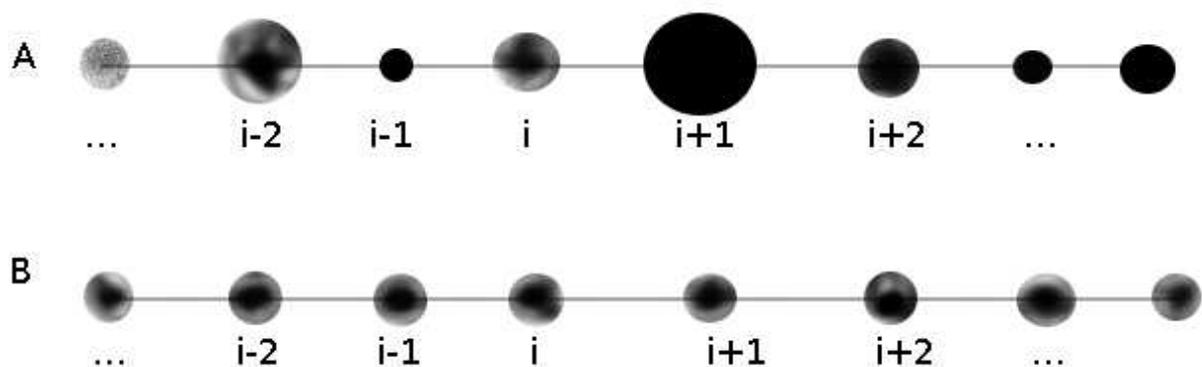


Fonte: G. Grosso (Grosso., 2014)

O modelo de Anderson, em linhas gerais, consiste de uma geometria com N^d sítios organizados em uma geometria perfeita de dimensão d ($d = 1$ seria uma cadeia com N sítios igualmente espaçados; $d = 2$ seria uma rede quadrada regular com N^2 sítios; $d = 3$ tere-

mos uma caixa cúbica com N^3 sítios). No modelo de Anderson, cada sítio representa um orbital atômico fixo. O modelo de Anderson considera a existência de um termo cinético que conecta sítios vizinhos e uma energia potencial eletrônica que representa a energia de ligação do elétron no sítio (orbital atômico). A energia cinética também é chamada de termo de hopping. A energia potencial ou também chamada de termo diagonal do Hamiltoniano vai representar a desordem do sistema (em geral). De fato, também é possível incluir desordem na energia cinética do modelo, entretanto modelos com desordem diagonal são mais intuitivos pois este tipo de desordem representa a falta de simetria composicional do sistema (ou seja, representa os diversos tipos de átomos que um sistema real em geral contém em sua estrutura interna). A desordem no termo de hopping está ligada, em geral, com deformações na estrutura geométrica da rede e/ou com interações entre a dinâmica eletrônica e as vibrações da rede. Por hora vamos deixar este debate da desordem no hopping para os capítulos posteriores. A figura (1.3)(A) enfatiza o modelo de Anderson com desordem diagonal. Na figura, as bolinhas (átomos) estão dispostas em sítios igualmente espaçados, entretanto o tamanho das bolas é diferente o que representa átomos diferentes e assim energia potencial diferente em cada sítio (isso é o que chamaremos de desordem ou distribuição de desordem).

FIGURA 1.4 – A) Representação esquemática de uma rede unidimensional com desordem. A desordem é representada aqui por bolinhas de tamanhos e texturas diferentes. B) Representação de uma rede unidimensional sem desordem, ou seja, o modelo de Bloch unidimensional.



Fonte: da Silva L.D. (da Silva, 2014)

Na abordagem de Anderson, o elétron pode ocupar os sítios da rede, assim, a energia de ligação do elétron em determinado sítio, i , da rede é a energia potencial ϵ_n . Como já enfatizamos previamente, o que vai caracterizar a desordem nesse sistema é o fato de que

as energias de cada sítio serão distribuídas de forma aleatória. Anderson considerou que tais energias estariam, então, compreendidas dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$, onde W caracteriza a largura da desordem no sistema. Vamos representar a energia de hopping como sendo $V_{n,j}$, ou seja, a energia necessária para que o elétron “salte” de um sítio n para um sítio vizinho j (ou vice-versa). Assim, o operador Hamiltoniano que descreve esse modelo é expresso por:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq j} V_{n,j} |n\rangle\langle j|. \quad (1.6)$$

$|n\rangle$ indica o estado que representa o orbital atômico centrado no sítio n . Uma representação matricial $N \times N$ do hamiltoniano de Anderson para o caso unidimensional é

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & V_{12} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ V_{21} & \epsilon_2 & V_{23} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_{32} & \epsilon_3 & V_{34} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & V_{43} & \epsilon_4 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & V_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & V_{N,N-1} & \epsilon_N \end{bmatrix}.$$

O conjunto formado pelos vetores $|n\rangle$ representa uma base em que podemos expandir seus autoestados ψ do hamiltoniano $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, onde, c_n caracteriza a amplitude da função de onda no sítio n . Para determinar os autoestados e as autoenergias, basta usar a equação de autovalores, ou seja, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Assim, permutando n, j e atuando $|n\rangle$ na expressão(1.6), iremos obter a seguinte expressão:

$$H|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle + \sum_{j \neq n} V_{jn}|j\rangle. \quad (1.7)$$

Agora, se atuarmos $|\psi\rangle$ em H , iremos obter,

$$H|\psi\rangle = \sum_n c_n H|n\rangle. \quad (1.8)$$

Combinando as expressões (1.7) com a expressões (1.8) fica,

$$H|\psi\rangle = \sum_n \epsilon_n c_n |n\rangle + \sum_{j \neq n} V_{jn} c_j |j\rangle. \quad (1.9)$$

Ao fazermos uma nova mudança de variável no segundo termo da equação (1.9),

$$H|\psi\rangle = \sum_n \left(\epsilon_n c_n + \sum_{n \neq j} V_{nj} c_j \right) |n\rangle, \quad (1.10)$$

como,

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1.11)$$

logo,

$$E \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \left(\epsilon_n c_n + \sum_{n \neq j} V_{nj} c_j \right) |n\rangle \quad (1.12)$$

$$\sum_n \left(E c_n - \epsilon_n c_n - \sum_j V_{nj} c_j \right) |n\rangle = 0 \quad (1.13)$$

e

$$Ec_n - \epsilon_n c_n - \sum_j V_{nj} c_j = 0 \quad (1.14)$$

Daí, obteremos a seguinte expressão,

$$Ec_n = \epsilon_n c_n + \sum_j V_{nj} c_j. \quad (1.15)$$

Portanto, se considerarmos um sistema unidimensional de sítio n , e utilizando o hopping deste sistema como sendo constante e diferente de zero entre os primeiros sítios vizinhos, e deixando, $V = V_{n,j}$, em evidência na expressão (1.15) iremos obter,

$$Ec_n = \epsilon_n c_n + V \sum_{j=n-1}^{j=n+1} c_j \quad (1.16)$$

que vai resultar em,

$$Ec_n = \epsilon_n c_n + V (c_{n-1} + c_{n+1}). \quad (1.17)$$

Para o caso de um sistema unidimensional sem desordem, ou seja, um sistema cristalino perfeito, como representado na figura (1.4).B, a largura da desordem, $W = 0$, e as energias potenciais do sítio, ϵ_n , são iguais. Assim, na equação (1.17), as energias potenciais desordenadas, ϵ_n passa a ser iguais a zero, logo,

$$Ec_n = V (c_{n-1} + c_{n+1}). \quad (1.18)$$

As soluções para esta equação são dadas por,

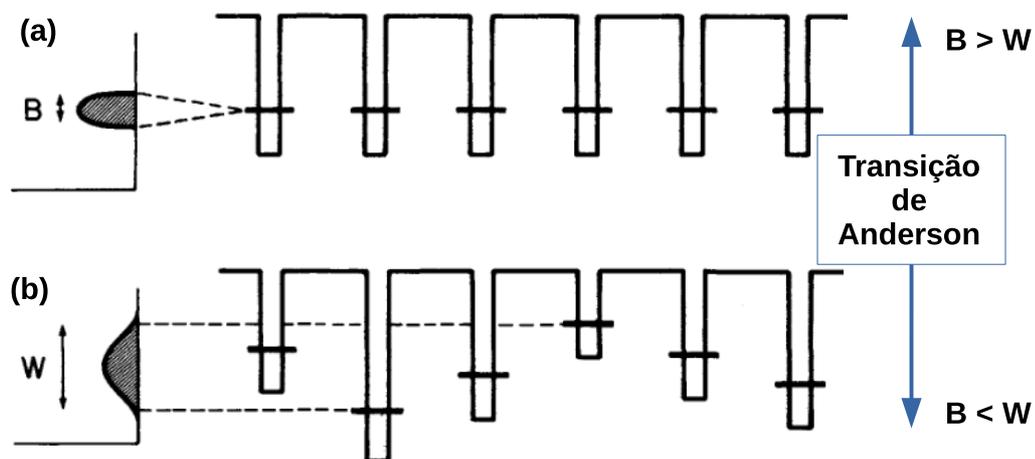
$$c_n = c_0 e^{ink}. \quad (1.19)$$

A equação a cima é satisfeita se,

$$E = 2V \cos(k), \quad (1.20)$$

Então a energia E está compreendida dentro do intervalo $-2V < E < 2V$. Logo, para um cristal $1d$ a largura da banda permitida é $B = 4V$. De forma geral, a largura da banda de energia permitida é expressa por $B = 2zV$, onde z representa o número dos primeiros vizinho de uma rede de dimensão d . Anderson em 1958, mostrou que se a razão entre W/B for suficientemente grande, ou seja, se W for suficientemente maior que B , todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados. O limite onde a razão W/B é aproximadamente 1 representa o regime de desordem intermediária.

FIGURA 1.5 – Representação da transição de Anderson no modelo tight-binding. A função de onda eletrônica tem localização induzida por desordem quando a faixa de desordem W é maior que a largura de banda de energia B .



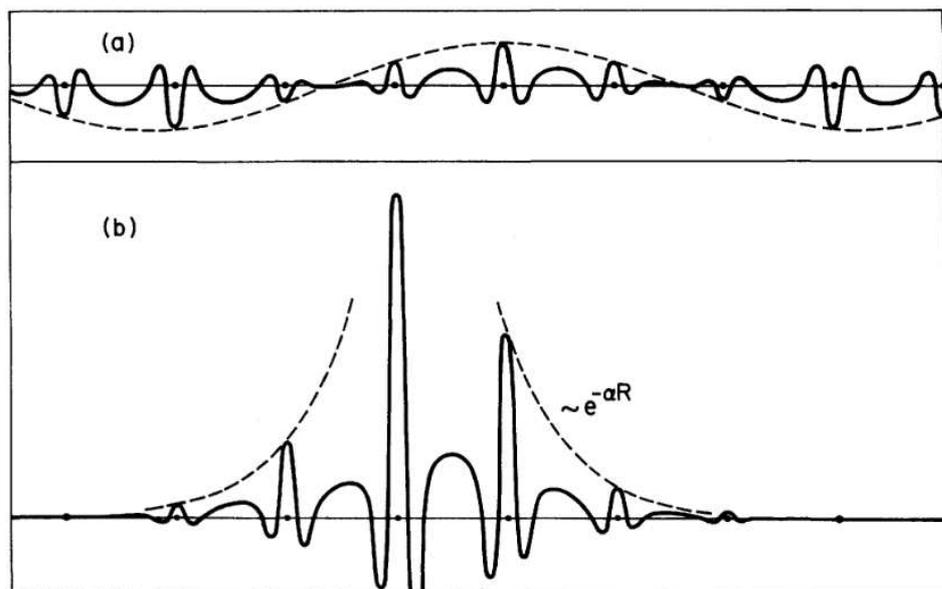
Fonte: R. Zallen (Zallen., 1983)

No caso de desordem intermediária, Anderson mostrou a possibilidade de uma transição de fase entre estados estendidos(características de um condutor) e estados localizados(característica de um isolante). Esta transição ficou conhecida na literatura como transição de Anderson. A figura(1.5) mostra uma ilustração da transição de Anderson. Em (a), para $B > W$, observamos que os sítios são representados por poços de profundidades iguais, o que indica potenciais com mesma intensidade, semelhante ao modelo de

Bloch, caracterizando assim, estados estendidos. Em (b), quando $B < W$, observamos que os sítios são representados por diferentes poços de potenciais. Note que os potenciais tem profundidades aleatórias, o que caracteriza a desordem no material e conseqüentemente estados exponencialmente localizados. Assim, a transição de Anderson ocorre entre as condições vistas em (a) e (b), onde W/B é aproximadamente 1.

A figura (1.6), traz uma visão pedagógica da função de onda para estados estendidos e estados exponencialmente localizados. Em (a), temos uma representação de estado estendidos da função de onda eletrônica. Em (b), mostramos uma ilustração para função de ondas exponencialmente localizada devido a presença de desordem no material.

FIGURA 1.6 – A figura traz uma ilustração de estados estendidos e estados localizados. Em (a), temos uma representação de estado estendidos da função de onda eletrônica. Em (b), mostramos uma ilustração para função de ondas exponencialmente localizada devido a presença de desordem no material.



Fonte: R. Zallen (Zallen., 1983)

O artigo de 1958 não deixou claro a relação entre a localização de Anderson e a dimensão do sistema. Foi aí que durante a década de setenta, Anderson e colaboradores estudaram, através de uma teoria de escala, a relação entre a localização de Anderson e a dimensão do sistema. A próxima seção será dedicada, então, a um estudo referente à teoria de escala para a transição de Anderson, isso, a fim de entender a relação entre a localização eletrônica e a dimensão do sistema.

1.4 Teoria de escala para a transição de Anderson

Vamos fazer aqui uma breve revisão da teoria de escala proposta por Anderson e colaboradores. Esta metodologia foi aplicada com o interesse de entender a dependência da localização dos autoestados com a dimensão do sistema (Abrahams et al., 1979). Em linhas gerais, neste trabalho publicado no ano de 1979, foi mostrado que em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade, ou seja, com dimensões menores iguais a dois, a transição de Anderson não é encontrada mesmo no limite de desordem fraca ($W \ll V$). A teoria de escala foi aplicada na reformulação do modelo de Anderson, proposta por Thouless (Thouless, 1977). Thouless toma como base a dependência de escala da condutância generalizada g . Nessa abordagem os sólidos são formados por várias caixas acopladas, e cada caixa tem volume L^d , onde L indica os lados da caixa e d indica as dimensões da mesma. As energias W e V do modelo de Anderson serão generalizadas para este modelo de hipercubos. A largura da desordem W será substituída pelo espaçamento médio entre os níveis de energia ΔE . ΔE tem que satisfazer a condição $\Delta E \approx \frac{W}{N}$, onde N são os níveis de energia com volume L^d . Já o termo de hopping V irá corresponder ao deslocamento causado pelas alterações nas condições de contorno de cada volume que ocupa o sólido δE . Logo, $\left(\frac{W}{V}\right)$ no modelo de Anderson nos fornece uma medida do grau de desordem, agora, analogamente, $\left(\frac{\Delta E}{\delta E}\right)$ tem característica de parâmetro de desordem do sistema. Se no interior da caixa de lados L o elétron executar um movimento aleatório, semelhante ao Movimento Browniano, então,

$$T_D = \frac{L^2}{D}. \quad (1.21)$$

Aqui, D é a constante de difusão e T_D é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônica difundir até os contornos da caixa. Fazendo uso da relação de incerteza

$(\delta T \delta E \geq \hbar)$, logo,

$$\delta E = \frac{\hbar}{T_D} \quad (1.22)$$

Com isso, a relação entre a condutância σ e as propriedades de difusão do sistema pode ser expressa por meio da relação de Einstein:

$$\sigma = e^2 D n(E). \quad (1.23)$$

Aqui, $n(E)$ é a densidade média de estados. Relacionado as equações (1.21), (1.22) e (1.23), iremos obter,

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}. \quad (1.24)$$

Assim, expressamos δE no limite macroscópico em função da condutividade σ . A densidade média de estados pode ser escrita como:

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}, \quad (1.25)$$

Agora, relacionado as equações (1.22) e (1.25), temos

$$\frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2}. \quad (1.26)$$

Logo, essa equação pode ser reescrita na forma,

$$g(L) \equiv \frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2}. \quad (1.27)$$

Nessa expressão $g(L)$ vai indicar a condutância generalizada. Como esperado, a equa-

ção (1.27) é semelhante a razão W/V no modelo de Anderson tradicional, que por sua vez, indica uma medida da intensidade do grau de desordem no sistema. Logo:

- $(\delta E > \Delta E)$ indica estados estendidos que são sensíveis à mudança nas condições de contorno;
- $(\delta E < \Delta E)$ indica estados localizados que não são sensíveis à mudança nas condições de contorno.

A equação (1.27) é aplicada somente para o caso de estados estendidos no limite macroscópico. Nela, $g(L)$ indica a condutância generalizada em unidades de $\frac{e^2}{h}$, pois o termo σL^{d-2} indica a condutância de um cubo de lados L e dimensão d . Portanto, a teoria de escala examina a dependência de $g(L)$ de acordo com o comprimento da escala utilizada. Agora, sendo g_0 a condutância generalizada para um sistema formado por uma caixa acoplada de volume L_0^d , ou seja,

$$g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)} = g_0. \quad (1.28)$$

Assim, dado g_0 numa escala de comprimento L_0 , a teoria de escala assume que podemos obter uma nova condutância g em termos de uma nova escala maior $L = bL_0$. Então, a nova condutância é claramente determinada pelas quantidades g_0 e pelo fator de escala b . Esta ideia é bem ilustrada na figura (1.7). Tratando b como uma transformação contínua, podemos analisar o comportamento de escala da função g a partir da seguinte função:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.29)$$

Analisando esta função, observamos que se $(\beta > 0)$, logo L cresce com o crescimento de g , enquanto que $(\beta < 0)$, g decresce com o crescimento de L . Na figura (1.8), há uma representação qualitativa de $\beta(g)$ para os seguintes valores de $d = 1, 2$ e 3 , tal figura foi

proposto por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan (Abrahams et al., 1979).

O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ pode ser melhor entendido tomando os limites assintóticos de $g \rightarrow 0$ e $g \rightarrow \infty$ na equação (1.29). Portanto:

- Para $(g \rightarrow \infty)$, ou seja, no limite de forte acoplamento e baixo grau de desordem, $g(L)$ é dada por:

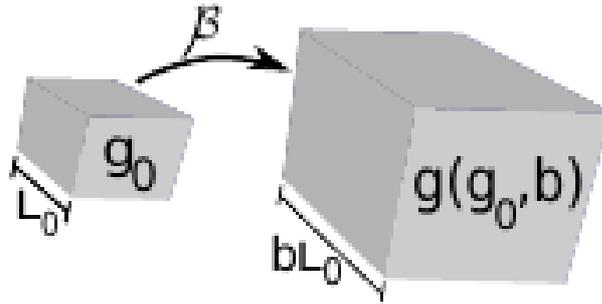
$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) \approx d - 2, \quad (1.30)$$

g cresce com o aumento de L , daí

$$\beta(g \rightarrow \infty) = \begin{cases} 1 & \text{para } d = 3, \\ 0 & \text{para } d = 2, \\ -1 & \text{para } d = 1. \end{cases} \quad (1.31)$$

Ver lado direito da figura (1.8).

FIGURA 1.7 – Representação qualitativa do comportamento da função de escala ($\beta(g)$) em relação as dimensões $d = 1, 2$ e 3 perante a teoria de escala mostrada por (Abrahams et al., 1979).



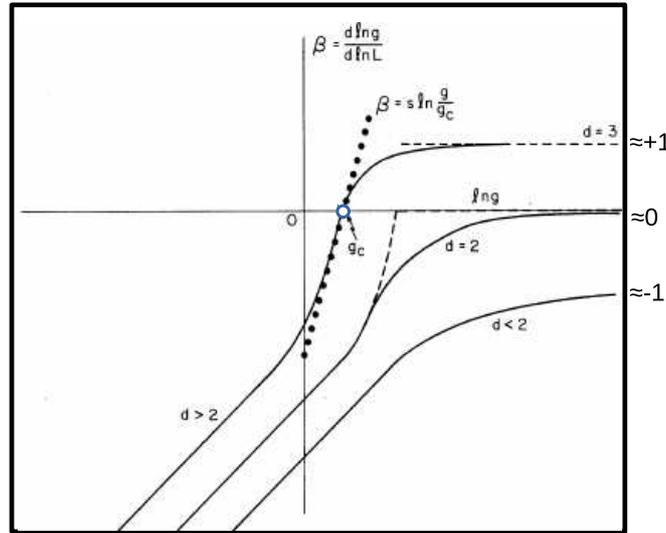
Fonte: Abrahams , 1979 (Abrahams et al., 1979)

- Para $(g \rightarrow 0)$, ou seja, no limite de fraco acoplamento e forte grau de desordem, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos são localizados e apresentam decaimento exponencial com a distância. Considerando um elétron confinado dentro de uma caixa de dimensões L , a amplitude da função de onda desse elétron é da ordem de $e^{-\Gamma L}$, nesse caso, Γ indica o expoente de Lyapunov (da Silva, 2014; Moura, 2003), que por sua vez, é o inverso do comprimento de localização λ .

O acoplamento entre as caixas também apresenta decaimento exponencial com L , ou seja, $g(L) \propto e^{-\Gamma L}$. A partir da equação (1.29), teremos que:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) \approx \ln g. \quad (1.32)$$

FIGURA 1.8 – Representação qualitativa do comportamento da função $\beta(g)$ em função da condutância g em termos das dimensões $d = 1, 2$ e 3 .



Fonte: E. Abrahams et al. (Abrahams et al., 1979)

Dentro desse contexto, podemos fazer as seguintes observações. Vejamos como $g \sim e^{-\Gamma L}$, ou seja, quando L aumenta a condutância diminui. Dai, a partir da equação (1.32) observamos que quando $g \rightarrow 0$, logo $\beta(g) \rightarrow \infty$, independente da dimensão. Analisando a figura (1.8) e assumindo que $\beta(g)$ varia lentamente e monotonicamente entre $(g) \rightarrow 0$ e $(g) \rightarrow \infty$, observamos que para $d = 1$ e $d = 2$, g diminui a medida que L cresce, logo não existe uma transição metal isolante. Agora, para $d = 3$, observamos dois comportamentos, eles são:

- $(\beta(g) > 0)$ g cresce a medida que L também cresce, característica de sistema condutor;
- $(\beta(g) < 0)$ g diminui a medida que L cresce, característica de sistema não condutor.

Isso nos mostra que para $d = 3$ observamos uma transição metal-isolante no sistema em um ponto crítico, g_c , que separa ($\beta(g) < 0$) e ($\beta(g) > 0$). Com isso, fica claro que a transição de Anderson está inteiramente ligada com a dimensão do sistema, ou seja, há transição em sistemas com 3 dimensões. Tal observação também é encontrada nas seguintes referências (Moura, 2003; Thouless, 1974; Wegner, 1976).

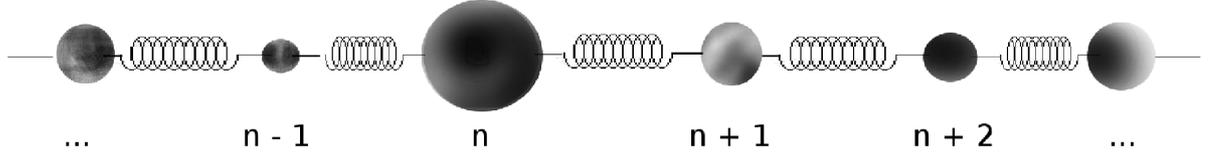
Contudo, importantes propriedades físicas da matéria são determinadas pelas vibração atômicas dos materiais e/ou suas interações com o transporte de carga. Dessa forma, com intuito de compreender a dinâmica dos modos vibração em sistemas unidimensionais, a próxima seção, será dedicada a fazer uma breve abordagem sobre as características dos modos vibracionais em uma cadeia harmônica desordenada unidimensional.

1.5 Interação elétron-fônon

Em todos os trabalhos apresentados até a seção anterior, apresentamos resultados relacionados ao transporte eletrônico em sistemas desordenados. Boa parte destes trabalhos, obtidos através da aproximação usada por Anderson, consideraram que os átomos da rede não têm mobilidade, ou seja, eles estão “parados”. Na verdade, é utilizado a chamada aproximação de Born-Oppenheimer (ou aproximação adiabática). Desta forma, a dinâmica atômica existe, mas é lenta comparado com o movimento eletrônico. Isso é bem razoável principalmente em baixas temperaturas. Entretanto, se temos o interesse em considerar modelos contendo aspectos mais reais, a presença de efeitos térmicos e concomitantemente fônons na rede é imprescindível (da Silva, 2016; Asada et al., 2004; Velarde, 2010; de Moura, 2013). Vamos fazer agora uma breve revisão acerca do tratamento básico para as vibrações atômicas em determinado sistema, bem como, uma estratégia eficiente para incluir a interação do elétron com as vibrações da rede. Enfatizamos que, em linhas gerais, vamos usar o formalismo unidimensional para descrever os fônons da rede, entretanto a teoria é geral e pode ser aplicada em qualquer dimensão. Enfatizamos ainda que, apesar de sabermos que as vibrações atômicas têm grande relação com a presença de banhos térmicos e/ou fluxo de calor, não vamos considerar aqui o termo de temperatura

explicitamente. Em linhas gerais, queremos apenas apresentar a descrição necessária para os fônons da rede e os termos de interação elétron-fônon.

FIGURA 1.9 – Representação esquemática de uma rede unidimensional com um conjunto de átomos desordenados acoplados por molas.



Fonte: da Silva, L. D. (da Silva, 2014)

Aqui, iremos assumir que os íons de uma rede unidimensional como ilustrado na figura (1.9), possuam movimentos oscilatórios em torno de um ponto de equilíbrio. Para isso, será necessário tratar classicamente os modos de vibração da rede. Assim, em nosso estudo vamos considerar inicialmente uma abordagem tipo oscilador harmônico clássico para os modos de vibração. Desta forma, o sistema completo elétron e rede podem ser representados por um Hamiltoniano efetivo composto com uma parte quântica (H_{ele}) referente à dinâmica eletrônica e uma parte clássica (H_{cadeia}) referente aos fônons da rede. Em linhas gerais, não existe formalmente nenhum erro nesta abordagem, pois para o cálculo das quantidades físicas de interesse, vamos usar o valor médio do Hamiltoniano clássico devidamente calculado no estado do sistema. Desta forma, o Hamiltoniano efetivo composto pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n (V_n |n\rangle \langle n+1| + V_n^* |n+1\rangle \langle n|) + \sum_n \frac{P_n^2}{2m_n} \\
 & + \sum_n \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2].
 \end{aligned}
 \tag{1.33}$$

O primeiro e segundo termo representam o Hamiltoniano de Anderson para um elétron com energia *on-site*, ϵ_n , e termo de hopping, V_n . Como o hopping é real, logo $V_n^* = V_n$. O terceiro e quarto termos do Hamiltoniano representam, respectivamente, a energia cinética das vibração das partículas e energia potencial relacionada a interação das partículas com as primeiras vizinhas. Q_n e P_n representam posição e momento respectivamente. O fator

$1/4$ que aparece no potencial harmônico é necessário para evitar a contagem duplicada da energia potencial harmônica em cada massa. Vamos considerar em nossa abordagem que a massa m_n de cada átomo, bem como as constantes das molas, β_n , são uniformes e com valores, $m_n = \beta_n = 1$. O acoplamento entre a parte eletrônica e a rede será feito através da energia de hopping V_n . Para introduzir acoplamento elétron-rede vamos considerar o termo de hopping:

$$V_n = -e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)}. \quad (1.34)$$

Nesta equação, α é um parâmetro que controla a intensidade da interação elétron-rede. Basicamente α será o acoplamento elétron-fônon. Analisando a equação (1.34), podemos perceber que, se os átomos localizados nas posições n e $n+1$ estiverem próximos o hopping é forte, caso contrário é bem fraco, esse decaimento exponencial é observado pelo sinal negativo encontrado no expoente. A abordagem apresentada na equação (1.34) é uma generalização da aproximação Su, Schrieffer e Heeger (SSH).

O Modelo (SSH) proposto por Su-Schrieffer-Heeger ([SU-Schrieffer-Heeger., 1979](#)) em 1979, teve como objetivo investigar os problemas que assumem a existência da alternância de ligações simples e duplas e acoplamento entre as cadeias relativamente fracas, isto é, comportamento quase-unidimensional. A motivação para esse estudo vem de evidências experimentais usadas em cadeias de $(CH)_x$, mais especificamente em técnicas Raman ([Lefrant., 1979](#); [Harada et al., 1978](#)). Dessa forma, o modelo SSH se dá pela aproximação de primeira ordem para $V_n = -e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)} \approx -[1 - \alpha(Q_{n+1} - Q_n)]$. Nas interações elétron-fônon, este fato é aplicado para pequenas vibrações nos sítios.

Para deduzir explicitamente as equação que controla as velocidades das vibrações da rede e a dinâmica do elétron, considere a equação de Schrödinger dependente do tempo escrita em termo do hamiltoniano H , $H|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle$. Ela pode ser escrita facilmente considerando o estado, $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n'} f_{n'}|n'\rangle$. Lembrando que a parte clássica do Hamiltoniano (1.33) não atua no estado $|\Psi(t)\rangle$, analisando, então, a atuação de $|\Psi(t)\rangle$ em

H ;

$$H|\Psi(t)\rangle = \left\{ \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n V_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \right\} |\Psi(t)\rangle. \quad (1.35)$$

então

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| \Psi(t)\rangle + \sum_n V_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \Psi(t)\rangle. \quad (1.36)$$

Sabendo que $H|\Psi(t)\rangle = H \sum_{n'} f_{n'} |n'\rangle = \sum_{n'} f_{n'} H|n'\rangle$. Analisando o termo $H|n'\rangle$, temos,

$$H|n'\rangle = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n|n'\rangle + \sum_n V_n |n\rangle \langle n+1|n'\rangle + \sum_n V_n |n+1\rangle \langle n|n'\rangle. \quad (1.37)$$

Como $\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$, então a equação (1.37) fica,

$$H|n'\rangle = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \delta_{n,n'} + \sum_n V_n |n\rangle \delta_{n+1,n'} + \sum_n V_n |n+1\rangle \delta_{n,n'}. \quad (1.38)$$

Assim,

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_{n'} f_{n'} (H|n'\rangle) = \sum_{n'} f_{n'} \left(\sum_n \epsilon_n |n\rangle \delta_{n,n'} + \sum_n V_n |n\rangle \delta_{n+1,n'} + \sum_n V_n |n+1\rangle \delta_{n,n'} \right). \quad (1.39)$$

Por fim podemos retornar a equação (1.36),

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,n'} f_{n'} \epsilon_n |n\rangle \delta_{n,n'} + \sum_{n,n'} f_{n'} V_n |n\rangle \delta_{n+1,n'} + \sum_{n,n'} f_{n'} V_n |n+1\rangle \delta_{n,n'}. \quad (1.40)$$

Usando a delta nas somas em cada termo, ou seja, $\sum_{n,n'} \phi_n \delta_{n,n'} = \sum_n \phi_n$ para $n = n'$,

teremos que:

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_n f_n \epsilon_n |n\rangle + \sum_n f_{n+1} V_n |n\rangle + \sum_n f_n V_n |n+1\rangle. \quad (1.41)$$

Observe que na expressão, $\sum_n f_n V_n |n+1\rangle$, fazendo, $m = n + 1$, e conseqüentemente, $n = m - 1$, assim, $\sum_n f_n V_n |n+1\rangle = \sum_m f_{m-1} V_{m-1} |m\rangle$, daí, para $m = n$, temos que, $\sum_n f_n V_n |n+1\rangle = \sum_n f_{n-1} V_{n-1} |n\rangle$. Assim, reescrevendo a equação (1.35):

$$H|\Psi(t)\rangle = \sum_n (f_n \epsilon_n + f_{n+1} V_n + f_{n-1} V_{n-1}) |n\rangle. \quad (1.42)$$

Dessa forma, retomando a equação de Schrödinger dependente do tempo, ou seja,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n f_n |n\rangle \quad (1.43)$$

e

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n f_n |n\rangle = H |n\rangle, \quad (1.44)$$

então,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n f_n |n\rangle = \sum_n (f_n \epsilon_n + f_{n+1} V_n + f_{n-1} V_{n-1}) |n\rangle \quad (1.45)$$

logo,

$$\sum_n (i\hbar \frac{d}{dt} f_n - f_n \epsilon_n - f_{n+1} V_n - f_{n-1} V_{n-1}) |n\rangle = 0. \quad (1.46)$$

Com a atuação de $|\Psi(t)\rangle$ em H , podemos reescrever a equação de Schrödinger dependente do tempo para cada componente f_n da função de onda como sendo:

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n + V_n f_{n+1} + V_{n-1} f_{n-1}. \quad (1.47)$$

Considerando o termo de hopping definido na equação (1.34), chegamos na equação que descreve a dinâmica eletrônica neste modelo com acoplamento elétron-fônon.

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n - e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)} f_{n+1} - e^{-\alpha(Q_n-Q_{n-1})} f_{n-1}. \quad (1.48)$$

Uma vez deduzida a equação que rege a dinâmica do elétron, precisamos deduzir a equação que descreve evolução temporal das vibrações harmônicas da rede. Vamos utilizar o formalismo de Hamilton para encontrar a equação que controla as vibrações atômicas. Do ponto de vista de mecânica clássica, a equação de Hamilton para o momento P_n neste problema, pode ser escrito como $\dot{P}_n = -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial Q_n}$, onde $\langle H \rangle = \langle \Psi(t) | H | \Psi(t) \rangle$. Substituindo o Hamiltoniano da equação (1.33), temos:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n &= -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial Q_n} = -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi(t) | \{ \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n V_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \\ &\quad + \sum_n \frac{P_n^2}{2} + \sum_n \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2] \} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Podemos observar que apenas o termo de hopping, V_n , e o termo de energia potencial clássica dependem da posição Q_n , desta forma, a derivada $-\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial Q_n}$ será composta pelos dois termos abaixo:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial Q_n} &= -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi(t) | \{ \sum_n V_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) + \\
 &\quad \sum_n \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2] \} | \Psi(t) \rangle.
 \end{aligned}
 \tag{1.50}$$

No primeiro termo podemos observar que os termos de ordem $n-1$ e n contém a posição Q_n , e desta feita, serão submetidos a derivada parcial $\frac{\partial}{\partial Q_n}$. Os demais termos do somatório não contém Q_n e, portanto, suas derivadas se anulam. Para o segundo somatório, temos que os termos de ordem $n-1$, n e $n+1$ contém a posição Q_n , e assim, irão contribuir com a derivada. Para os demais termos as derivadas também são nulas. Dessa forma, podemos organizar a derivada como sendo:

$$\begin{aligned}
 \dot{P}_n &= -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi | \{ [V_{n-1} (|n-1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n-1|) \\
 &\quad + V_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|)] \\
 &\quad + [\frac{\beta_n}{2} (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \frac{\beta_{n-1}}{2} (Q_n - Q_{n-1})^2] \} | \Psi(t) \rangle.
 \end{aligned}
 \tag{1.51}$$

Agora substituindo V_n e V_{n-1} como definido na equação (1.34) e atuando $\langle \Psi(t) |$ e $| \Psi(t) \rangle$, temos:

$$\begin{aligned}
 \dot{P}_n &= -\frac{\partial}{\partial Q_n} \{ -e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})} (\langle \Psi(t) | n-1 \rangle \langle n | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | n \rangle \langle n-1 | \Psi(t) \rangle) \\
 &\quad + [-e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)} (\langle \Psi(t) | n \rangle \langle n+1 | \Psi(t) \rangle) + \langle \Psi(t) | n+1 \rangle \langle n | \Psi(t) \rangle] \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi(t) | [\frac{\beta_n}{2} (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \frac{\beta_{n-1}}{2} (Q_n - Q_{n-1})^2] | \Psi(t) \rangle.
 \end{aligned}
 \tag{1.52}$$

Lembrando que,

$$\langle \Psi(t) | n-1 \rangle \langle n | \Psi(t) \rangle = \sum_n f_n^\dagger \langle n | n-1 \rangle \sum_n f^\dagger \langle n | n \rangle = f_{n-1}^\dagger f_n \quad (1.53)$$

De maneira equivalente,

$$\langle \Psi(t) | n \rangle \langle n+1 | \Psi(t) \rangle = f_n^\dagger f_{n+1} \quad (1.54)$$

Logo, para o complexo conjugado das equações (1.53) e (1.54) temos, respectivamente,

$$(f_{n-1}^\dagger f_n)^\dagger = f_{n-1} f_n^\dagger \quad (1.55)$$

e

$$(f_{n+1}^\dagger f_n)^\dagger = f_{n+1} f_n^\dagger. \quad (1.56)$$

Logo, a equação (1.52) pode ser reescrita como sendo:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n &= -\frac{\partial}{\partial Q_n} \{ -(f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger) e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})} \\ &\quad - (f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger) e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)} \} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi(t) | \{ [\frac{\beta_n}{2} (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \{\frac{\beta_{n-1}}{2} (Q_n - Q_{n-1})^2\}] | \Psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.57)$$

Portanto, calculando as derivadas e fazendo $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$ no segundo termo do lado esquerdo da equação (1.57), temos que,

$$\begin{aligned} \dot{P}_n &= \alpha \{ -e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})} (f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger) \\ &\quad + e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)} (f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger) \} \\ &\quad + \beta_n (Q_{n+1} - Q_n) - \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1}). \end{aligned} \quad (1.58)$$

Dessa forma, deduzimos explicitamente a equação que controla as velocidades das vibrações da rede. O problema composto da interação elétron-rede pode ser resolvido através da resolução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo para cada componente f_n da função de onda (1.48) e da equação anterior (1.58).

A resolução numérica dessas equações podem ser feitas através de métodos tradicionais de cálculo numérico como métodos de Runge-Kutta de alta ordem, Método de Euler e o Método de Taylor. Observe que na ausência do acoplamento elétron-fônon, $\alpha = 0$ as equações funcionam como dois problemas separados: um, com elétron propagando-se em uma cadeia com $V_n = 1$, equação (1.48), o que nos remete naturalmente ao modelo de Anderson, e outro problema de uma cadeia harmônica unidimensional com sítio de massas, m_n constante, acopladas por molas de contante elásticas β_n , também constante.

Ainda analisando α , observamos que para, $\alpha > 0$, o acoplamento elétron-fônon introduz uma dependência temporal na energia de hopping V_n , ligando assim, a função de onda eletrônica as vibrações harmônicas da rede.

Em alguns estudos anteriores, o acoplamento elétron-fônon foi investigado considerando um limite adiabático, onde a vibração de cada átomo seria proporcional a densidade eletrônica local, ou seja, $Q_n \propto |f_n|^2$. Nessa abordagem, (Dias, 2011), foi demonstrado que a presença de não linearidade na equação de Schrödinger dependente do tempo pode revelar diversos novos fenômenos, entre eles, a chamada transição de *self-trapping* onde o elétron fica preso na rede devido ao intenso potencial diagonal oriundo da não linearidade. A abordagem apresentada neste capítulo, que contempla tanto a dinâmica eletrônica quanto a dinâmica da rede, foi pouco estudada na literatura, entretanto, já concebe resultados bem interessantes. Recentemente, em 2014, Sales e Moura (Sales, 2014) estudaram o transporte eletrônico em uma estrutura não harmônica unidimensional com interação cúbica entre os sítios vizinhos mais próximos. Como resultado eles obtiveram indícios de que a onda solitônica que existe dentro dessa rede não-linear pode controlar a dinâmica de elétrons ao longo da cadeia. Os trabalhos de Manuel Velarde, por exemplo, (Velarde, 2010; Chetverikov, 2011), vêm sendo demonstrado que a existência de acoplamento elétron-fônon pode ser um fator de amplificação do transporte de carga. Vale salientar, que na abordagem utilizada

na referência (Velarde, 2010), a rede apresenta interações não harmônicas entre os átomos, favorecendo assim, o aparecimento de modos solitônicos. Em 2015, Ranciaro Neto, Sales e Moura (Neto, 2016) publicaram um trabalho que estuda a dinâmica de um pacote de ondas inicialmente localizadas em cadeias desordenadas unidimensionais sob o efeito da interação elétron-fônon e um bombeamento de uma ondas acústicas. Nesse modelo, o elétron foi inicialmente localizado no primeiro sítio da cadeia, com isso, foi adicionado um bombeamento de uma onda acústica na extremidade esquerda da cadeia. Nesse trabalho, é relatado evidências numéricas com relação ao transporte eletrônico sub-difusivo. No ano seguinte, da Silva, Moura e colaboradores (da Silva, 2016), publicaram um trabalho que merece destaque. Nesse trabalho, os autores investigam o transporte eletrônico em um modelo unidimensional com quatro tipos diferentes de átomos e desordem correlacionada de longo alcance. Nesse estudo, a dinâmica do pacote de onda é controlada considerando o acoplamento elétron-fônon e a presença de um campo externo, assim, na ausência do acoplamento elétron-fônon, a presença do campo elétrico promove oscilações coerentes do pacote de onda para um forte grau de desordem correlacionada. Já com a presença do acoplamento, foi observado que o espalhamento por fônons destrói totalmente as oscilações de Bloch. Portanto, os resultados indicam que o acoplamento utilizado nessa abordagem promove o transporte de carga mesmo na presença de desordem sem correlação.

Todavia, compreender os comportamentos vibracionais em cadeias atômicas não é uma tarefa fácil. Tal dificuldade ainda é mais evidenciada ao considerarmos redes com propriedades Anarmônicas (Dias, 2011; Sales, 2014; da Silva, 2017). A este respeito, apresentaremos na próxima seção um dos trabalhos precursores dentro desta temática. Iremos apresentar um trabalho referente à Redes Anarmônicas com Potenciais do tipo Fermi-Pasta-Ulam, que de maneira geral, trata de força atuando entre os sítios vizinhos de uma cadeia finita seja descrita pela adição de um termo não-linear, quadrático ou cúbico, acrescido a equação que controla as vibrações da rede.

1.6 Redes Anarmônicas: Potenciais tipo Fermi-Pasta-

Ulam

O experimento numérico pioneiro Fermi-Pasta-Ulam (FPU) tem papel importante dentro da história da simulação computacional, pois ele é precursor de vários outros experimentos e aplicações teóricas (de Moura, 2013; da Silva, 2017). O problema FPU tem o nome de três cientistas: Enrico Fermi, John Pasta e Stanislaw Ulam. Nesse problema, eles estudaram aspectos vibracionais em uma rede não-linear (Fermi, 1955), com o objetivo de entender como um cristal evolui para o equilíbrio térmico. O modelo propõe que a força agindo entre os sítios vizinhos de uma cadeia finita seja descrita pela adição de um termo não-linear, quadrático ou cúbico, onde as constantes que caracterizam a intensidade destas correções não-lineares sejam constantes de não-linearidade. A abordagem proposta por FPU é conhecida como (A -FPU), que corresponde ao termo quadrático das forças de interação e (B -FPU) que corresponde aos termos cúbicos dessas interações. Neste caso, os potenciais correspondentes às interações podem ser obtidos a partir de forças decorrentes das vibrações da rede, o (A -FPU) é obtido através de forças de interação quadrática e o (B -FPU) provido de forças de interação cúbica (Toda., 1989). Enfatizamos que na descrição original usada por FPU, o modelo com forças quadráticas foi chamado de α -FPU e o modelo com forças cúbicas foi chamado de β -FPU. Mudamos a notação para A e B para evitar quaisquer confusões com nossa notação de acoplamento elétron-fônon (α) e a constante de mola harmônica (usualmente chamada de β). Assim, o hamiltoniano, H_{FPU} , que descreve o modelo FPU (A e B) para uma rede não-linear clássica unidimensional com N massas idênticas pode ser escrito como :

$$\begin{aligned}
 H_{FPU} = & \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{P_n^2}{2m} + \frac{\beta}{4} [(Q_{n+1} - Q_n)^2 - (Q_n - Q_{n-1})^2] \right. \\
 & + \frac{\eta}{6} [(Q_{n+1} - Q_n)^3 - (Q_n - Q_{n-1})^3] \\
 & \left. + \frac{\gamma}{8} [(Q_{n+1} - Q_n)^4 - (Q_n - Q_{n-1})^4] \right\}.
 \end{aligned}$$

(1.59)

Nesta equação, novamente definimos Q_n como sendo o deslocamento do átomo n ao longo da cadeia em relação a sua posição de equilíbrio. P_n representa o momento linear decorrente das vibrações atômicas. O parâmetro β é a constante de mola harmônica e η e γ medem respectivamente as constantes de forças quadráticas e cúbicas. Observe que novamente temos fatores devidamente normalizados na parte da energia potencial (1/4, 1/6 e 1/8). Estes fatores foram obtidos simplesmente dividindo os fatores multiplicativos associados com as energias harmônicas, cúbicas e quárticas (respectivamente 1/2, 1/3 e 1/4) por dois (2). Esta normalização evita que a energia potencial por massa seja contada em dobro devido ao somatório. O hamiltoniano que descreve o movimento de um elétron ao longo da cadeia é novamente dado pela equação abaixo

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N \epsilon_n f_n f_n^\dagger + \sum_{n=1}^N V_n (c_{n+1}^\dagger f_n + f_n f_{n+1}^\dagger) \quad (1.60)$$

Na equação (1.60), ϵ_n representa a energia potencial *on-site*, f_n^\dagger e f_n são, respectivamente, operadores de criação e aniquilação, V_n é o termo de hopping definido novamente como: $V_n = e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)}$. α novamente representa o termo responsável pelo acoplamento do elétron com os fônons da rede. Assim, o hamiltoniano completo, $H = H_{ele} + H_{FPU}$, equações (1.59) e (1.60).

Ao aplicarmos o estado $H|\Psi(t)\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$, podemos obter a equação que descreve o movimento das vibrações (fônons) juntamente com a interação elétron-fônon ao longo de uma rede:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 Q_n}{dt^2} &= \beta(Q_{n+1} - 2Q_n + Q_{n-1}) \\ &+ \eta[(Q_{n+1} - Q_n)^2 - (Q_n - Q_{n-1})^2] \\ &+ \gamma[(Q_{n+1} - Q_n)^3 - (Q_n - Q_{n-1})^3] \\ &+ \alpha[e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)}(f_{n+1}^\dagger f_n + f_{n+1} f_n^\dagger) \\ &- e^{-\alpha(Q_n-Q_{n-1})}(f_n^\dagger f_{n-1} + f_n f_{n-1}^\dagger)]. \end{aligned} \quad (1.61)$$

Atualmente podemos encontrar diversos trabalhos que tratam de potenciais tipo FPU

(Alder., 1997; Velarde, 2010; Velarde., 2012). Dentro desta abordagem podemos destacar o trabalho proposto por Sales e de Moura (Sales, 2014). Nesse trabalho os autores investigam um modelo considerando um elétron movendo-se ao longo de uma rede unidimensional com N massas e não-linear do tipo (A -FPU), assim, eles analisaram o transporte eletrônico mediado pelo acoplamento com ondas solitônicas. Em 2013, de Moura (de Moura, 2013), através de soluções numéricas das equações da dinâmica, mostrou evidências de que excitações solitônicas induzidas por interações cúbicas não-lineares podem governar a dinâmica eletrônica ao longo de toda a rede. Em (Velarde., 2012), podemos encontrar evidências numéricas definitivas para a possibilidade do rápido transporte elétron-sóliton ao longo dos eixos cristalográficos de redes anarmônicas bidimensionais.

1.7 Interação do elétron com um pulso acústico

Nesta seção vamos apresentar uma descrição sucinta de um formalismo teórico simplificado que possibilita investigar a dinâmica eletrônica na presença de um bombeamento acústico. Em linhas gerais vamos fazer uso do formalismo de interação elétron-rede descrito nas seções anteriores e incluir o acoplamento de um oscilador externo em uma das extremidades da estrutura atômica. Em nossa abordagem vamos considerar uma cadeia com N átomos, entretanto o formalismo pode ser facilmente generalizado para dimensões superiores. Se faz necessário enfatizar que o estudo teórico e experimental sobre a influência de modos acústicos na propagação de cargas vem ganhando grande interesse nos últimos 40 anos (Slbodnik., 1976). Em (Mayer., 1995), apresenta um estudo teórico com a aplicação das chamadas ondas acústicas de superfície (SAW) em meios com elasticidade não-lineares e lineares. A respeito do estudo sobre o transporte eletrônico mediado por SAW, em (Shilton, 1996), aborda o transporte de um elétron de alta frequência em um canal de GaAs quase-unidimensional. Mais tarde, em (Shilton, 1996), mostra através de resultados experimentais que o transporte de “cargas” oriundo de ondas acústicas em um canal unidimensional pode ser um meio viável para produzir um padrão de corrente

elétrica. Em (Mcneil, 2011), os autores utilizaram um pulso de SAW para auxiliar na transferência de elétrons ao longo de dois pontos quânticos. Ou seja, este tipo de tema vem ganhando grande apelo tanto experimental quanto teórico, e claro, contém diversas questões que merecem ser investigadas.

Em nosso estudo vamos considerar uma cadeia composta por N partículas de massas m acopladas por molas de contante k . Dessa forma, neste primeiro exemplo, consideramos a Lei de Hook com $m = k = 1$. Vale ressaltar que, ao considerarmos que os átomos têm característica idêntica, a rede é perfeitamente cristalina. O hamiltoniano H_{rede} capaz de descrever este modelo é escrito pela equação (1.62).

$$H_{rede} = \sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N [(Q_{n+1} - Q_n)^2 - (Q_n - Q_{n-1})^2] \quad (1.62)$$

Naturalmente o primeiro termo, $\sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2m}$, representa a energia cinética da rede devido a movimentação das partículas. E considerando a interação harmônica entre os primeiros sítios vizinhos, temos então o segundo termo do Hamiltoniano que representa a energia potencial da rede devido ao potencial harmônico que conecta as massas. Assim, podemos escrever a equação clássica que governa a vibrações da rede, ou seja,

$$\frac{dQ_n^2}{dt^2} = Q_{n+1} - 2Q_n + Q_{n-1}. \quad (1.63)$$

Esta equação (1.63) nos mostra a dinâmica dos fônons ao longo da rede de tamanho N . Logo, uma das formas para gerar as ondas acústicas de superfície na extremidade esquerda da cadeia, ou seja, no sítio $n = 0$, e se propagando ao longo da cadeia num intervalo de tempo Δt , basta fazer $Q_n(t = 0) = P_n(t = 0) = 0$ com n dentro do intervalo $[1, N]$ e gerar um pulso harmônico (1.64) ou gaussiano (1.65), como se segue,

$$Q_0 = A_0 \cos \omega t \quad (1.64)$$

e

$$Q_0 = A_0 e^{-t^2/\zeta} \cos \omega t. \quad (1.65)$$

Nas equações (1.64) e (1.65), A_0 é a amplitude de oscilação, ζ é uma constante e ω é a frequência de bombeamento. Usando este formalismo podemos, então, simular um pulso (harmônico e/ou gaussiano) forçando uma cadeia harmônica. Obviamente este formalismo acima citado não representa uma onda acústica de superfície real, principalmente devido a dimensionalidade do sistema. Entretanto usando esta metodologia simples podemos considerar a interação de um modo acústico com a rede e podemos também incluir a presença de elétrons. Para incluir um elétron precisamos basicamente considerar um Hamiltoniano quântico e assim reescrever as equações acopladas para o sistema elétron-rede. A diferença fundamental neste caso é que a massa “zero” da cadeia será “controlada” pelo oscilador externo conforme as equações (1.64) ou (1.65). No artigo publicado em 2016 por Ranciaro Neto e colaboradores (Neto, 2016), eles trabalham com a dinâmica de um pacote de ondas inicialmente localizado em uma cadeia desordenada unidimensionais sob o efeito da interação elétron-fônon e um bombeamento de uma onda acústica. Foi demonstrado numericamente que a presença do bombeamento acústico pode promover o transporte eletrônico sub-difusivo.

Em linhas gerais, neste capítulo de introdução fizemos uma breve revisão dos temas pertinentes ao nosso estudo e apresentamos em linhas gerais o formalismo básico que vamos usar em nosso trabalho. Em resumo, vamos investigar as propriedades de transporte em dois modelos distintos e buscar evidências numéricas sólidas sobre o tipo de transporte existente, bem como, sua dependência com a desordem e/ou termos de interação. No segundo capítulo mostraremos nossos estudos sobre as propriedades físicas em sistemas desordenados unidimensionais na presença de interação elétron-rede e bombeamento de ondas acústicas. Neste capítulo estudamos sistemas desordenados harmônicos, bem como sistemas não lineares. Nossa abordagem permite uma interessante comparação entre os dois casos. No terceiro capítulo, vamos apresentar um estudo sobre o transporte de

energia vibracional em sistemas desordenados bidimensionais. Neste estudo consideramos uma rede harmônica com desordem correlacionada nas massas. Nossos cálculos numéricos permitiram uma descrição detalhada sobre quais modos vibracionais conseguem se propagar neste sistema amorfo.

2 Transporte eletrônico em cadeias desordenadas não-lineares na presença de modos acústicos.

2.1 Introdução

Neste capítulo vamos apresentar nossa contribuição dentro do contexto de transporte eletrônico em cadeias desordenadas não lineares na presença de interação elétron-rede e bombeamento de pulso acústico gaussiano. Como já foi mencionado no capítulo anterior, a dinâmica eletrônica mediada pela ondas acústicas tem atraído um intenso interesse dentro da comunidade científica particularmente no contexto das chamadas ondas acústicas de superfície (Shilton, 1996; Shilton, 1996; Mcneil, 2011). Este campo de pesquisa consiste em uma grande mistura de teorias do estado sólido que incluem, por exemplo, a teoria da localização de Anderson (Anderson, 1958; Izrailev, 2012), interação elétron-rede e piezoelectricidade (Mcneil, 2011). Nesse contexto, uma das interessantes investigações experimentais de transporte eletrônico induzido por (SAW), foi feita em 1996 por J. M. Shilton e colaboradores (Shilton, 1996). Nesse trabalho, os autores aplicaram uma onda acústica de superfície a um gás de elétrons bidimensional em um sub-estrato de “arsenieto de gálio”(GaAs – AlGaAs). No mesmo ano, J. M. Shilton e colaboradores publicaram outro trabalho (Shilton, 1996) em que foi mostrado uma investigação experimental sobre o fluxo eletrônico mediado por alta frequência (SAW) em heteroestruturas de GaAs. Em (Mcneil, 2011), os autores conseguiram mover um elétron ao longo de dois pontos quânticos “um

fo” seguindo uma espécie de “ping-pong”. Recentemente, Neto e colaboradores (Neto et al, 2016) usando um formalismo numérico investigaram a dinâmica de um pacote de ondas inicialmente localizadas em cadeias harmônicas desordenadas unidimensionais sob o efeito da interação elétron-rede e do bombeamento de uma onda acústica. Nesse trabalho, eles detectaram numericamente que existe um transporte eletrônico sub-difusivo promovido pelo bombeamento de ondas acústicas.

Em nosso trabalho, investigamos a competição intrínseca entre a não linearidade cúbica e o bombeamento de um pulso acústico. Consideramos o elétron na cadeia não-linear desordenada com um formalismo proposto por Fermi, Pasta, Ulam (Fermi, 1955; Poggi, 1997). Enfatizamos novamente que este modelo propõe que a força que age entre os átomos vizinhos de uma cadeia finita seja descrita pela soma de um termo não-linear quadrático ou cúbico. Desta forma, usando um formalismo de uma partícula vamos considerar os efeitos da desordem, da interação elétron-fônon e também a influência de pulso acústico gaussiano sendo bombeado através da rede. Em nosso formalismo teórico, consideramos a dinâmica eletrônica usando o formalismo da Mecânica Quântica e para as vibrações atômicas não-lineares da rede usando o formalismo da Física Clássica. Estudamos assim, a propagação do pacote de onda e usamos uma solução numérica das equações quântica/clássica. Para resolver este problema, usamos o formalismo de Euler de Segunda Ordem e para resolver a parte clássica, e para a parte quântica, usamos o formalismo de Taylor. Estes formalismo numéricos foram exaustivamente testados e comparados com métodos tradicionais da literatura de equações diferenciais, tais como o Rung-Kutta de quarta ordem(RK4). Se faz importante enfatizar que nossa metodologia foi mais eficiente pois além de ter encontrado os mesmos resultados encontrados através do RK4 o tempo computacional foi aproximadamente três vezes menor. Como resultados observamos que o bombeamento usando pulsos acústicos associados à interação elétron-rede promove uma dinâmica eletrônica sub-difusiva.

2.2 Modelo e Formalismo

Em nosso modelo, consideramos um elétron movimento-se em uma cadeia desordenada com N átomos acoplados por molas. A força de acoplamento associada com estas molas será descrita exatamente pelo chamado modelo A -FPU, ou seja, um potencial harmônico e um potencial cúbico. Seguindo o mesmo procedimento apresentado na seção (1.5) a dinâmica eletrônica será investigada usando um hamiltoniano quântico para o elétron e um formalismo clássico para as vibrações da rede. Para este sistema, o hamiltoniano completo é descrito por $H = H_{ele} + H_{cadeia}$ (Neto et al, 2016; Chetverikov, 2011; Sales, 2014), onde H_{ele} descreve a parte eletrônica e H_{cadeia} diz respeito à cadeia, assim:

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N \{ \epsilon_n c_n^\dagger c_n + V_{n+1,n} (c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}) \}, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} H_{cadeia} &= \sum_n \left\{ \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4} [(Q_{n+1} - Q_n)^2 + (Q_n - Q_{n-1})^2] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\eta}{6} [(Q_{n+1} - Q_n)^3 + (Q_n - Q_{n-1})^3] \right\}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Temos que c^\dagger e c são operadores de criação e aniquilação do elétron no sítio n . ϵ_n representa a desordem atômica aleatoriamente distribuída no intervalo $[-W/2, W/2]$, onde W caracteriza a largura da desordem. $V_{n+1,n}$ é a energia cinética do elétron (ou termo de hopping). P_n e Q_n representam respectivamente o momento e a posição do sítio n . Nós consideramos m_n como a distribuição de desordem das massa gerado pela expressão $m_n = e^{\rho_n}$, onde ρ_n são números aleatórios uniformemente distribuídos dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$. η representa a força da não-linearidade cúbica em nosso modelo. Seguindo as ideias apresentadas no seção (1.5), o termo de hopping dependerá da distância relativa entre dois átomos consecutivos na cadeia, assim, $V_{n+1,n} = e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)}$ (Chetverikov, 2011), e a quantidade α definirá a força de acoplamento elétron-rede.

A dependência temporal da função de onda, $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$, será obtido por

meio da solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. A dinâmica vibracional será obtida através das equações de Hamilton da mecânica clássica. Considerando $\hbar = 1$, a equação de Schrödinger para as amplitudes de Wannier e as equações para Q_n podem ser escritas como:

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = \epsilon_n c_n(t) - e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)} c_{n+1}(t) - e^{-\alpha(Q_n-Q_{n-1})} c_{n-1}(t). \quad (2.3)$$

e

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} &= [(Q_{n+1} - Q_n) - (Q_n - Q_{n-1})] \\ &+ \eta [(Q_{n+1} - Q_n)^2 - (Q_n - Q_{n-1})^2] \\ &+ \alpha \{ e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)} (c_n^\dagger c_{n+1} + c_n c_{n+1}^\dagger) \\ &- e^{-\alpha(Q_n-Q_{n-1})} (c_{n-1}^\dagger c_n + c_{n-1} c_n^\dagger) \} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Nosso experimento numérico será conduzido da seguinte forma: Inicialmente vamos assumir que o elétron está totalmente localizado no sítio $n = 1$, ou seja, $|\Psi(t = 0)\rangle = \sum_n c_n(t = 0) |n\rangle$, onde $c_n(t = 0) = \delta_{n,1}$. Como estamos interessados em incluir o efeito de um pulso Gaussiano sendo bombeado na rede, vamos considerar também que para $t = 0$ a posição da extremidade esquerda da rede será dada por:

$$Q_0 = A_0 e^{(-t^2/2\Delta t^2)} \cos(\omega t), \quad (2.5)$$

Onde ω representa a frequência do pulso acústico gaussiano e $\Delta t = 1/\Delta\omega$, que é o período de oscilação. Enfatizamos ainda que no tempo inicial ($t = 0$), as demais massas da rede vão ser colocadas no seguinte estado: $Q_n(t = 0) = \dot{Q}_n(t = 0) = 0$ para n dentro do intervalo $[1, N]$. Ou seja, todas as massas estão inicialmente paradas e em suas posições

de equilíbrio. Apenas a massa $n = 0$ receberá o bombeamento.

Para resolver numericamente as equações quânticas, aplicamos um algoritmo de expansão de Taylor (de Moura et al., 2011) ao operador de evolução temporal, ou seja:

$$U(\delta t) = \exp(-iH_{ele}\delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} [(-iH_{ele}\delta t)^l]/(l!). \quad (2.6)$$

A evolução temporal da função de onda no tempo δt é dada por $|\Psi(\delta t)\rangle = U(\delta t)|t = 0\rangle$, assim, podemos usar este método recursivamente para obter a função de onda num instante t . Para a parte clássica, usamos um método de correção de Euler de segunda ordem. O processo recursivo de Euler pode ser definido da seguinte forma: inicialmente vamos obter uma previsão da posição das massas no tempo δt , ou seja, $(Q_n(\delta t)^*)$, usando o método de Euler de primeira ordem:

$$Q_n(\delta t)^* \approx Q_n(t = 0) + \delta t \left. \frac{dQ_n}{dt} \right|_{t=0} \quad (2.7)$$

Após esta etapa, podemos aplicar uma fórmula de correção para então melhorar esta estimativa inicial, ou seja:

$$Q_n(\delta t) \approx Q_n(t = 0) + \frac{\delta t}{2} \left[\left. \frac{dQ_n}{dt} \right|_{t=0} + \left. \frac{dQ_n^*}{dt} \right|_{\delta t} \right]. \quad (2.8)$$

Dessa forma, as equações (2.7) e (2.8) podem ser usadas recursivamente para obter $Q_n(t)$. Nossos cálculos foram realizados usando $\delta t = 10^{-3}$ e usamos a expansão de Taylor no operador evolução temporal até $n_0 = 12$. Assim, obtemos a norma da função de onda com um erro $|1 - \sum_n |c_t^2|| < 10^{-10}$ ao longo de todo intervalo de tempo. Vale ressaltar que a norma é uma importante verificação da precisão do nosso procedimento numérico. É importante reconhecer que o formalismo de Euler de segunda ordem não é a maneira tradicional de resolver a equação clássica (2.4). Então, para verificar a precisão numé-

rica e confiabilidade dos nossos cálculos, foi usado também o Runge-Kutta quarta ordem (RK4) (Hairer et al, 2007) para resolver as equações (2.3) e (2.4). Os resultados obtidos com o nosso formalismo numérico não mostram diferenças significativas em relação aos resultados obtidos com o RK4. Um ponto importante em nosso formalismo é a velocidade computacional que é bem elevada em comparação com o RK4 (chega a ser três vezes mais rápido em alguns experimentos). As propriedades físicas analisadas em nosso estudo são: posição média (centroide) $\langle n(t) \rangle$, desvio médio quadrático $\sigma(t)$ e a entropia de Shannon $S(t)$ definida como na referência (Chetverikov, 2011; Santos et al, 2006), então:

$$\langle n(t) \rangle = \sum_n (n) |c_n|^2, \quad (2.9)$$

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n - \langle n(t) \rangle)^2 |c_n(t)|^2} \quad (2.10)$$

e

$$S(t) = - \sum_n |c_n(t)|^2 \ln[|c_n(t)|^2]. \quad (2.11)$$

O centroide representa a posição média do estado eletrônico para um dado tempo t . O desvio médio quadrático e a Entropia de Shannon são duas formas distintas de estimar o número de sítios sob os quais o pacote de ondas se espalha ao longo do tempo t (o tamanho médio do pacote de onda). Considerando que a função de onda seja uniforme, todos os sítios têm a mesma amplitude da função de onda, $|c_n| = 1/\sqrt{N}$, logo, $|c_n|^2 = 1/N$. Ao substituímos esta expressão na Entropia de Shannon (2.11), temos, $S(t) = - \sum_n (1/N) \ln[1/N]$, então, $S(t) = \ln[N]$. Assim, quando a onda é uniformemente estendida sobre toda a cadeia, $N \propto t$, ou seja, $S(t) \propto \ln[t]$.

Dessa forma, podemos analisar as quantidades físicas da seguinte forma:

- Para estados estendidos;

$$\sigma(t \rightarrow \infty) \propto N \quad e \quad S(t \rightarrow \infty) \propto \ln(N) \quad (2.12)$$

- Para estados localizados;

$$\sigma(t \rightarrow \infty) \propto l_0 \quad e \quad S(t \rightarrow \infty) \propto \ln(l_0) \quad (2.13)$$

Onde l_0 está próximo do maior comprimento de localização. Devido a presença de desordem no sistema, l_0 é da ordem de poucos sítios e, portanto, $\sigma(t)$ e $S(t)$ convergem para pequenas constantes.

Em nosso estudo, a ideia da localização eletrônica estará associada essencialmente ao tipo de difusão encontrada. Como o cálculo para tempo longo não é um processo simples, principalmente neste contexto de equações acopladas, vamos investigar a dinâmica para tempos intermediários. O tipo de difusão tem uma relação praticamente direta com as propriedades de condução e/ou a natureza dos estados eletrônicos. Em linhas gerais o pulso inicial (no caso uma função delta) é uma superposição de todos (ou quase todos) autoestados do hamiltoniano e assim a dinâmica para tempos intermediários acaba trazendo assinaturas dos autoestados com maiores comprimentos de localização. Em geral estados estendidos tem propagação rápida. Estados localizados acabam não apresentando propagação para tempos intermediários. Estados críticos ou fracamente localizados podem apresentar uma dinâmica sub-difusiva, difusiva ou super difusiva (em alguns casos). Dessa forma, vamos fazer uma breve revisão dos conceitos de movimento balístico, movimento difusivo, movimento sub-difusivo e super-difusivo. Assim, o movimento balístico é entendido como um movimento sem aceleração, ou seja, a quantidade que mede a distância ou tamanho (X) é proporcional ao tempo (t). Quando X é proporcional a \sqrt{t} , este movimento é chamado de difusivo (um exemplo clássico deste tipo de movimento é

o chamado “ movimento Browniano”). Portanto, considerando que o expoente de X em função de t ($X \propto t^\Theta$) é uma quantidade fundamental para entender nossos resultados, vamos então resumir as denominações corretamente:

- se $\Theta = 1.0 \rightarrow$ balístico;
- se $\Theta = 0.5 \rightarrow$ difusivo;
- se $\Theta < 0.5 \rightarrow$ sub-difusivo;
- se $0.5 < \Theta < 1 \rightarrow$ super-difusivo.

Sem dúvida este tipo de estudo numérico deve ser feito com o devido cuidado e também o total entendimento das limitações teóricas e computacionais intrínsecas. Em linhas gerais, vamos calcular a posição média e também a largura do pacote de onda para tempos chamados intermediários. Um estudo comparativos das duas quantidades pode, sem dúvida alguma, ofertar grandes indícios sobre a presença ou não de transporte de carga neste modelo. Se a posição eletrônica $\langle n(t) \rangle$ for constante ao longo do tempo ($\langle n(t) \rangle \propto t^0$) e a largura do pacote de onda (medido através de σ ou $S(t)$) for também independente do tempo, teremos fortes indícios de que o sistema não apresenta transporte de carga, ou seja, é um isolante. Por outro lado, caso as quantidades físicas $\langle n(t) \rangle$, σ e $S(t)$ apresentem um crescimento com o tempo, mesmo um crescimento lento, este resultado de fato indica algum tipo de difusão. Entretanto, é sempre importante mencionar que existe uma clara limitação nesta abordagem, que é a escala de tempo considerada. Em boa parte destes estudos adimensionais, as unidades temporais são sempre deixadas de lado. Em nosso estudo vamos seguir a mesma conduta adimensional, entretanto vamos discutir este ponto de forma breve. Fazendo uso das unidades reais e considerando o termo de hopping médio na ordem de um elétron-volt, a escala de tempo característica aqui é de picosegundos. Boa parte dos estudos teóricos sobre dinâmica eletrônica em sistemas de baixa dimensionalidade são feitos para tempos de 10^4 ou no máximo 10^5 unidades. Assim, reconhecemos que de fato estamos trabalhando em tempos bem curtos ($10^4 ps$ ou $10^5 ps$). Entretanto, em sistemas desordenados, qualquer mínima difusão (mesmo lenta) nestas escalas de tempo na presença de desordem representa um grande progresso, principalmente no contexto atual da chamada nanoeletrônica e/ou bioeletrônica.

Dentro desse contexto, em 2014 foi publicado um trabalho que apresenta as principais propriedades físicas de dispositivos nanobiostruturados a base de DNA (Albuquerque, 2014). Os autores usam correlações para desempenhar o papel quase periódico visto no DNA. Embora correlações de longo alcance sejam responsáveis pelo transporte eletrônico efetivo em energias ressonantes específicas de segmentos de DNA finitos, grande parte da disseminação anômala de um pacote de onda eletrônica inicialmente localizado pode ser avaliada por correlações de pares de curto alcance, sugerindo que uma abordagem baseada em uma inclusão de mais correlações de curto alcance na distribuição de nucleotídeos leva a uma descrição adequada das propriedades eletrônicas dos segmentos de DNA. As contribuições não-lineares, decorrentes do acoplamento entre elétrons e as vibrações moleculares, promovem um fenômeno de auto-armadilhamento eletrônico (self-trapping), abrindo assim a possibilidade de controlar a propagação da densidade eletrônica por um campo externo. As principais características dos dispositivos nanobiostruturados baseados em DNA apresentados neste trabalho inclui: densidade eletrônica de estados, perfis de energia, propriedades hemodinâmicas, localização, efeitos de correlação, leis de escala, análise fractal e multifractal e cristais anidros de suas bases, entre outros. São também apresentados e discutidos novos recursos, como outros dispositivos nanobiostruturados, bem como as orientações futuras neste campo estudo.

No próximo capítulo apresentaremos alguns dos nossos resultados a respeito das propriedades de transporte eletrônico em cadeias desordenadas não-lineares na presença de modos acústicos.

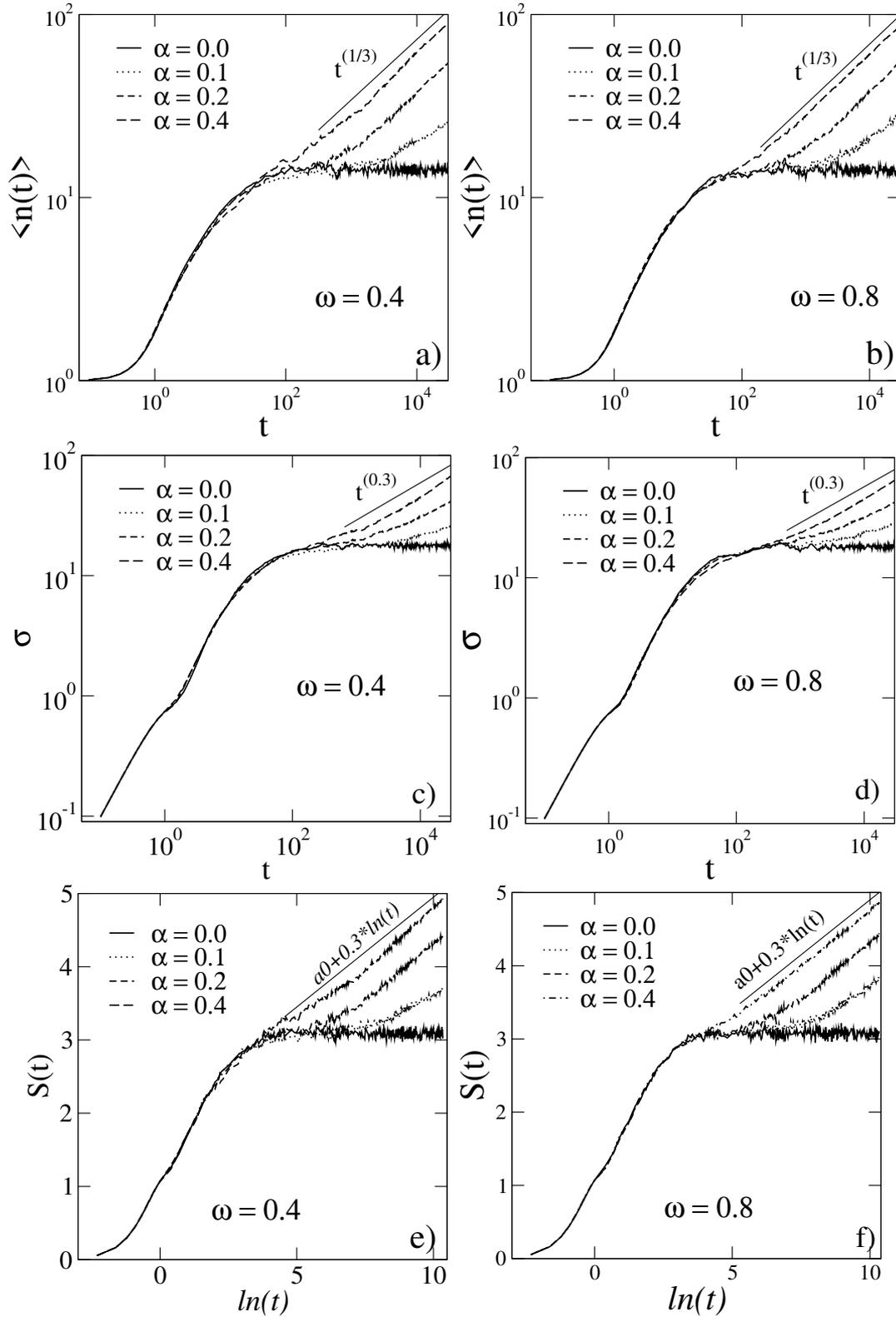
2.3 Resultados e Discussões

Vamos apresentar agora uma síntese de nossos resultados. Para resolver as equações diferenciais (2.3) e (2.4) utilizamos um truque chamado “cadeia auto-expandida”. Este procedimento é interessante para evitar efeitos de bordas. Nossos estudos foram efetuados em uma longa cadeia com $N > 10^4$ sítios entretanto nós iniciamos a integração numérica das equações (2.3) e (2.4) considerando uma pequena fração destes sítios. Consideramos

inicialmente um pequeno segmento com 200 sítios localizado na extremidade esquerda da cadeia, exatamente onde está sendo feito o bombeamento. Sempre que a probabilidade de encontrar o elétron ou a vibrações atômica na borda direita deste segmento inicial exceder 10^{-20} , dez novos sítios são adicionados e assim a extremidade direita deste segmento vai se deslocando (e este segmento inicial vai se expandindo). Enfatizamos que procedemos com o cálculo numérico da norma da função de onda para cada tempo e a conservação da mesma foi obtida. Este teste é importante pois a normalização é um dos primeiros critérios que podem aferir a credibilidade de nossos cálculos numéricos. Na sequência de figuras (2.1) de (a-f), mostramos um resumo dos nossos cálculos para algumas quantidades físicas, ou seja, as quantidades físicas definidas nas equações (2.9), (2.10) e (2.11). Montamos em (a-b) o Centroide Eletrônico versus Tempo t , em (c-d) o Desvio Médio Quadrático versus Tempo t e em (e-f) a Entropia de Shannon versus $\ln(t)$ para $W = 2$, $\omega = 0.4, 0.8$, $\eta = 0, 2$, e $\alpha = 0.0, 0.1, 0.2, 0.4$. É importante mencionar que $W = 2$ neste tipo de problema é uma desordem considerável, pois o tempo de hopping médio é igual a 1, logo a desordem neste caso, é da mesma ordem de grandeza que a energia cinética.

Foi observado que para $\alpha = 0$ todas as quantidades saturam ao longo do tempo, que por sua vez, é uma consequência direta da presença de desordem dentro de nosso modelo. Assim, em sistemas unidimensionais com desordem não correlacionada todos os autoestados estão localizados e, portanto, um pacote de onda inicialmente localizado, evolui um pouco, entretanto permanece restrito a uma região finita da mesma ordem do maior comprimento de localização (Neto et al, 2016). O comportamento encontrado no centroide, desvio médio quadrático e a entropia de Shannon também sinaliza o forte papel da desordem neste caso uma vez que o tamanho da região onde o elétron permanece localizado foi de alguns poucos sítios. A medida que o parâmetro de correlação α aumenta, observamos uma mudança drástica nos resultados, (ver figuras (2.1)(e-f)). A dependência temporal das quantidades físicas aqui estudadas, sugerem que o acoplamento elétron-rede com o bombeamento acústico pode empurrar o elétron ao longo da cadeia. Dentro da escala de tempo que estudamos, nossos cálculos sugerem uma dinâmica sub-difusiva com

FIGURA 2.1 – Na figura (2.1) encontramos resultados referente ao Centroide $\langle n \rangle$ versos o Tempo t (a-b), Desvio Médio Quadrático $\sigma(t)$ versos o Tempo t (c-d) e Entropia de Shannon $S(t)$ versos o $\ln(t)$ (e-f). Para isso usamos $W = 2$, $\omega = 0.4, 0.8$, $\eta = 0, 2$ e $\alpha = 0.0, 0.1, 0.2, 0.4$



$\langle n(t) \rangle \propto t^{1/3}$ e $\sigma \propto t^{0.3}$ e por sua vez, a Entropia de Shannon segue uma tendência sub-difusiva com $S(t) \approx a_0 + 0.3 \ln(t)$. Na figura (2.2)(a-b), mostramos o Módulo Quadrado da função de onda $|c_n|^2$ versus n e t , para isso, usamos $W = 2$, $\omega = 0.4$ e $\alpha = 0.0$ (a) e $\alpha = 0.4$ (b). Estes resultados nos dá uma visão pedagógica da dinâmica do elétron ao longo da cadeia. Na ausência do acoplamento elétron-rede, ou seja, $\alpha = 0$, observamos um aglomerado de picos da função de onda em torno da posição inicial, $n = 1$. Na presença do acoplamento elétron-rede, $\alpha > 0$, observamos que mesmo com a presença de desordem não correlacionada, há espalhamento da função de onda ao longo da cadeia. Ressaltamos que esta observação viola claramente a teoria padrão da localização de Anderson.

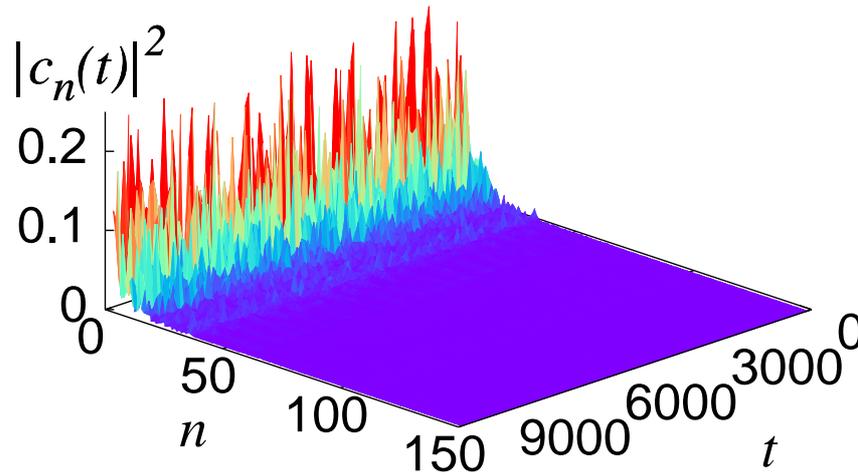
A fim de compreender melhor a dinâmica eletrônica e sua relação com a dinâmica da rede, vamos investigar algumas especificidades da deformação da rede com mais detalhe. Para isso, calcularemos um tipo de probabilidade generalizada de deformação local f_n . Esta quantidade será obtida calculando inicialmente a quantidade, $x_n = (1 - e^{Q_{n-1} - Q_n})^2$ e assim, normalizando a quantidade x_n , podemos obter f_n , ou seja, $f_n = x_n / \sum_n(x_n)$.

Usando esta quantidade podemos calcular a posição Média das vibrações da cadeia ($\langle n_v \rangle = \sum_n n f_n$) e também a dispersão $\sigma_v = \sqrt{\sum_n (n - \langle n(t) \rangle)^2 f_n}$. Na figura (2.3)(a-b) mostramos um breve resumo de nossa análise numérica sobre a propagação de energia vibracional dentro deste modelo. Na figura (2.3)(a), traçamos a probabilidade generalizada da deformação local f_n versus n e t para uma cadeia com $W = 2$, $\eta = 0,2$, $\alpha = 0,2$ e $\omega = 0,4$. Podemos ver que o bombeamento acústico claramente se propaga ao longo da cadeia em uma tendência similar a que foi observada na Figura (2.2) (b).

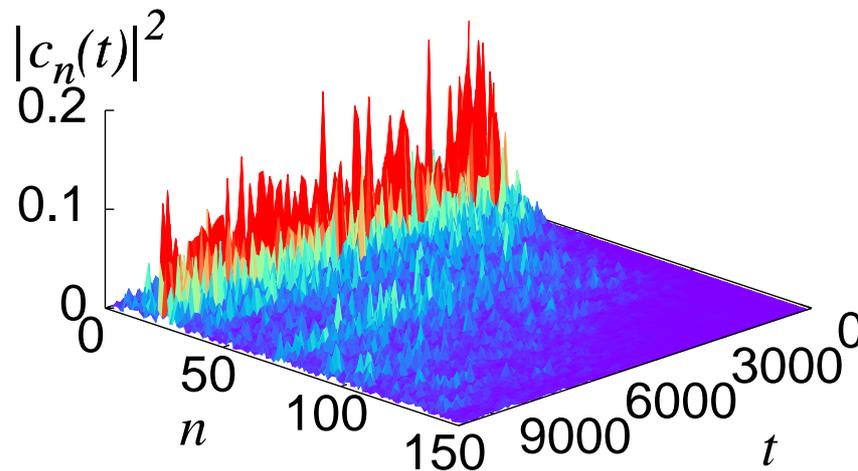
Na figura (2.3)(b), podemos encontrar os resultados referentes a $\langle n_v \rangle$ e σ_v . Os cálculos foram feitos usando o mesmo raciocínio da figura (2.3)(a). Observamos que a posição média das vibração da rede segue uma dinâmica difusiva. O deslocamento quadrático médio do pacote de ondas de energia segue um comportamento super-difusivo. Contudo, estes resultados sobre a dinâmica energética merecem uma discussão mais detalhada. Visitando a referência (de Moura et al., 2003), sabemos que a evolução de um pacote de onda inicialmente localizado dentro de uma cadeia harmônica clássica desordenada

FIGURA 2.2 – Na figura (2.2) Encontramos resultados referente ao módulo quadrado da função de onda $|c_n(t)|^2$ versus o tamanho da cadeia n versus o tempo t . Para isso usamos $W = 2$, $\eta = 0.2$, $\alpha = 0.4$ e $\alpha = 0.2$ (a) e $\alpha = 0.4$ (b). Observamos que a presença de interação elétron-rede promove a propagação da função de onda eletrônica.

a) $\alpha = 0.0$ $\omega = 0.4$ $\eta = 0.2$



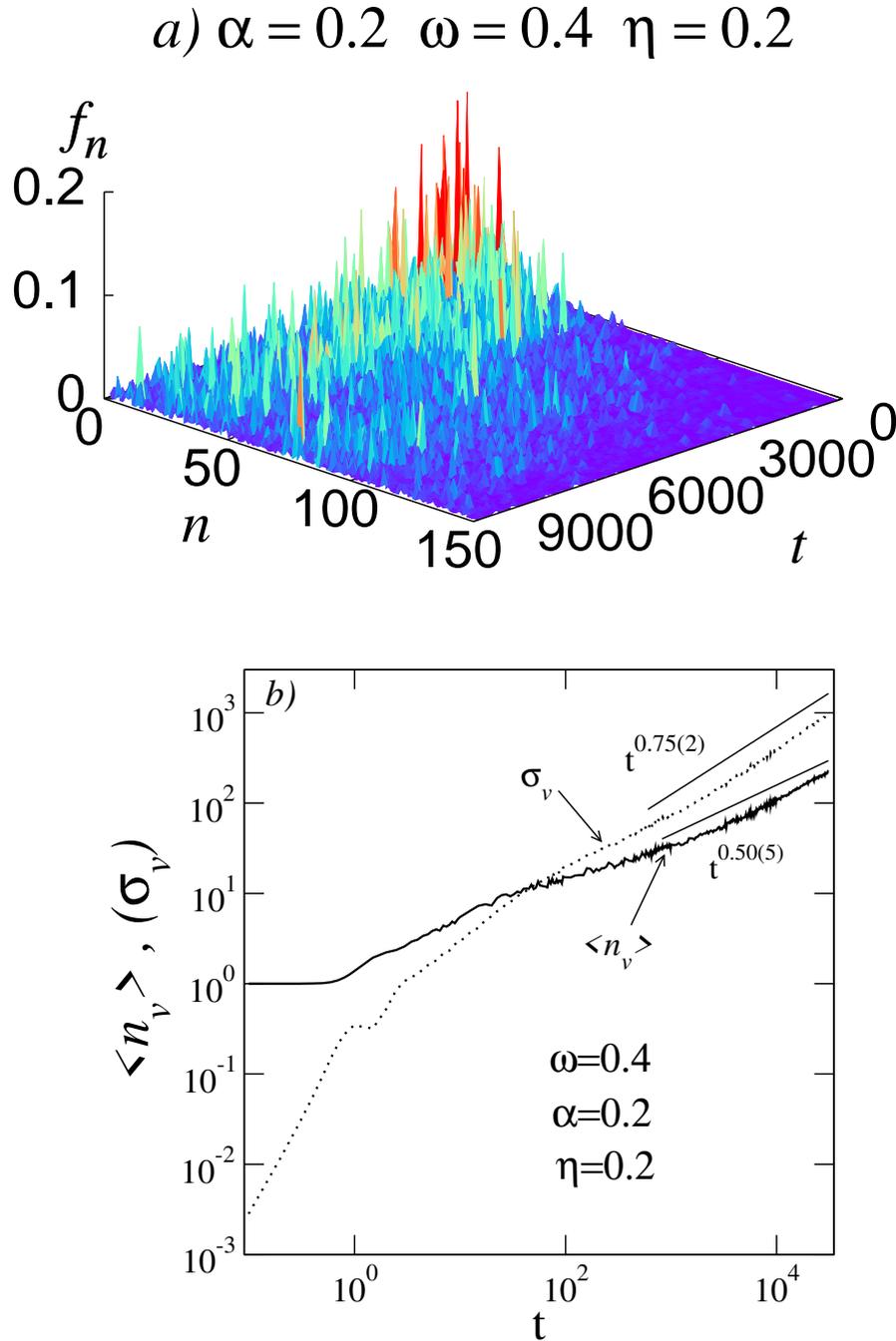
b) $\alpha = 0.4$ $\omega = 0.4$ $\eta = 0.2$



Fonte: Autor 2017

($\eta = 0$) segue uma tendência super-difusiva semelhante. Em primeiro lugar, enfatizamos que o bombeamento acústico gaussiano que usamos promove uma espécie de injeção contínua na rede estudada. Portanto, apesar da condição inicial usada em nosso trabalho

FIGURA 2.3 – Na figura (2.3)(a) Encontramos resultados referente a Probabilidade Generalizada da Deformação Local c_n versus n e t para uma cadeia com $W = 2$, $\eta = 0,2$, $\alpha = 0,2$ e $\omega = 0,4$. Para a figura (2.3)(b) podemos encontra os resultados referente a $\langle n_v \rangle$ e σ_v .



Fonte: Autor 2017

ser diferente do formalmente utilizado na referência (de Moura et al., 2003), ambos contêm a mesma natureza física. Outra informação importante e nova em nossos cálculos, é a presença de dinâmicas super-difusivas em cadeias não-lineares desordenadas. Ressaltamos que nossos cálculos foram feitos para uma rede clássica com interação quadrática e cúbica

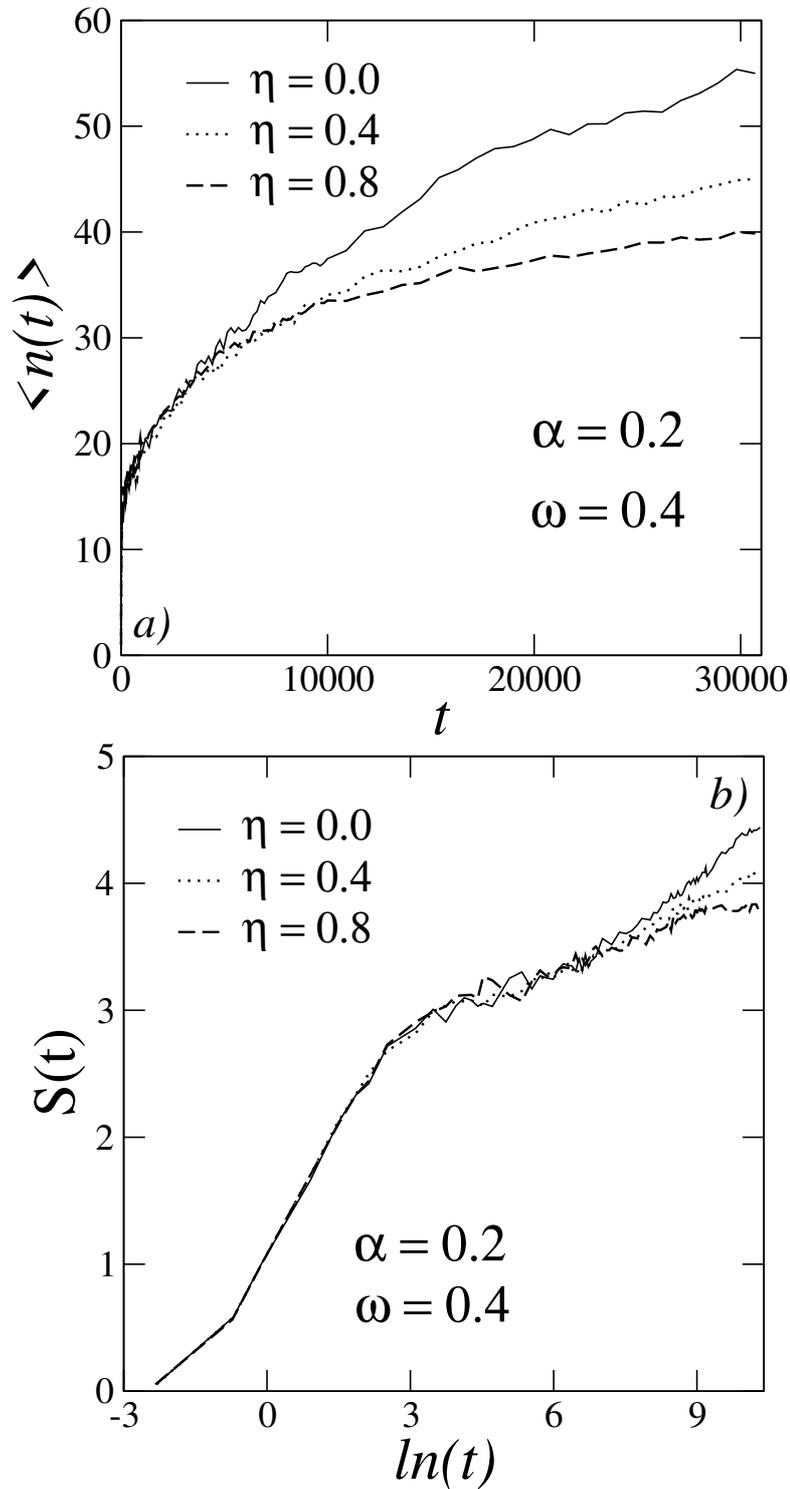
com $\eta > 0$. Nossos resultados também sugerem que o potencial cúbico não altera o tipo de propagação de energia dentro das aproximações que usamos. Antes de concluir nosso trabalho, mostraremos alguns breves resultados da localização da função de onda com η variando.

A figura (2.4) mostra nossos cálculos para a Posição Média $\langle n \rangle$ e a Entropia de Shannon $S(t)$ versus o Tempo t para $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$, $W = 2$ e $\eta = 0.0, 0.4, 0.8$. Nossa análise inicial mostra que a Posição Média e a Entropia de Shannon parece diminuir à medida que η aumentada. Com base nesses cálculos, o transporte de elétrons mediado pelo bombeamento acústico é mais eficiente em cadeias harmônicas ($\eta = 0$). No entanto, reconhecemos que o intervalo de η que consideramos não é suficientemente para realmente obter uma afirmação mais conclusiva. Ressaltamos que à medida que a magnitude do potencial cúbico aumenta nas cadeias desordenadas, a instabilidade numérica aumenta e, portanto, se torna complicado resolver as equações diferenciais.

Em resumo estudamos o transporte eletrônico em cadeias desordenadas não lineares na presença de acoplamento elétron-rede e um pulso acústico Gaussiano. Estudamos um regime de considerável nível de desordem para sistemas unidimensionais. Dentro do regime de desordem aqui considerado, o transporte de carga em uma cadeia não é permitido. No entanto mostramos que, se o termo de acoplamento elétron-rede é incluído junto com o bombeamento de um pulso acústico atravessando a rede podemos empurrar o elétron através da rede de forma sub-difusiva. Nossos cálculos também revelaram que, neste tipo de abordagem, cadeias desordenadas harmônicas são mais eficientes para o transporte de carga. A presença de não linearidade se revelou um pouco prejudicial ao processo de difusão eletrônica.

No próximo capítulo apresentaremos uma investigação a respeito da propagação de energia vibracionais em uma rede harmônica bidimensional desordenada. Nesse modelo consideraremos que as massas dos átomos são aleatórias e acopladas com as massas vizinhas através de molas simples, ou seja, vale a lei de Hooke. Neste estudo vamos investigar o papel das correlações na distribuição de desordem sobre o fluxo de energia vibracional.

FIGURA 2.4 – Na figura (2.4)(a) Encontramos resultados referente a Posição Média $\langle n \rangle$ em função de t para $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$ e $\eta = 0.0, 0.4, 0.8$. Na figura (2.4)(a) os resultados são referentes a $S(t)$ versus $\ln(t)$ para $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$ e $\eta = 0.0, 0.4, 0.8$.



Fonte: Autor 2017

3 Modos de Vibração em Redes Harmônicas Bidimensionais

3.1 Introdução

Como já foi descrito na introdução, bem como no capítulo anterior, um dos resultados mais fortes da teoria da localização é a ausência de propagação eletrônica em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade ([Abrahams et al., 1979](#); [Izrailev, 2012](#); [Kramer., 1993](#)). Como observamos no capítulo dois o termo de interação elétron-fônon associado com um pulso acústico pode promover um transporte sub-difusivo. Entretanto existem outras maneiras de violar a teoria de Anderson; uma delas é introduzir correlações na distribuição de desordem ([de Moura, 1998](#); [de Moura, 2004](#); [Adame., 2003](#)). Em linhas gerais, foi mostrado que se a distribuição de desordem contém correlações locais e/ou correlações de longo alcance é possível obter transporte, inclusive transporte balístico ([Izrailev, 2012](#)). Um dos estudos que ganhou grande atenção da comunidade científica foi a classe de modelos com correlações de longo alcance na desordem. Nestes modelos, a distribuição de desordem não apresenta um comprimento de correlação característico, pois a função de correlação intrínseca da desordem é aproximadamente uma lei de potencia. Foi demonstrado de forma numérica, analítica e experimental que este tipo de sistema apresenta uma banda condutora, em geral próxima ao centro da banda mesmo para o caso de dimensão baixa ($d = 1$ ou 2).

Se faz importante mencionar que a teoria da localização é uma teoria bem geral e

pode ser aplicada em diversos sistemas que tenham comportamento ondulatório e desordem. Um exemplo disso é a propagação de modos vibracionais em cadeias ou redes harmônicas desordenadas. Assim foi demonstrando que a maioria dos modos vibracionais em cadeias harmônicas unidimensionais com distribuição de massas desordenadas são localizados (Dean., 1964). Também foi demonstrado que existem alguns modos de baixa frequência não localizados, cujo número é da ordem de \sqrt{N} , sendo N o número de massas na cadeia (Dean., 1964; Matsuda., 1970; Ishii., 1973). Formalmente o modo de frequência $\omega = 0$ é um modo uniforme que não “sente” a desordem existente no sistema. Este modo não apresenta deformação na rede e sim um movimento “combinado” onde todas as massas se deslocam de maneira a não deformar as molas e assim o efeito da desordem fica blindado. Este modo representa um modo de comprimento de onda grande (ou formalmente infinito) que não é difratado pelos espalhadores internos (a desordem). Enfatizamos que desordem correlacionada também foi investigado dentro do contexto de sistemas harmônicos unidimensionais. Por exemplo, nas referências (Adame., 1993; Datta., 1993) os autores mostram que correlações de curto alcance promove o aparecimento de alguns modos vibracionais estendidos. Entre os modelos com correlação de curto alcance, vale destacar também, as cadeias unidimensionais com desordem diluído (Albuquerque et al., 2005). A desordem diluído, consiste de duas sub-redes interpenetrantes, uma composta por massas aleatórias e a outra por massas periódicas. Para este tipo de estudo, verificou-se o aparecimento de energias ressonantes especiais, gerando um conjunto de estados estendidos. Cadeias harmônicas com desordem correlacionada de longo alcance foram estudadas na referência (de Moura., 2003). Neste caso foi observado a existência de estados estendidos em regiões de altas frequências.

A maior parte da literatura relacionada aos modos vibracionais em sistemas harmônicos desordenados, apresenta a dimensionalidade como um grande problema. De maneira geral, os autores preferem investigar cadeias desordenadas unidimensionais. Com isso, redes harmônicas bidimensional com desordem correlacionado é um campo ainda pouco conhecido. Em 2008, de Moura e Ranciaro Neto (de Moura., 2008), investigaram a natureza dos modos vibracionais em redes harmônicas bidimensionais com correlação de longo

alcance. Nesse trabalho, a distribuição de massas aleatórias exibiu uma densidade espectral tipo lei de potência, $S(k) \sim 1/k^\alpha$. Os autores consideraram apenas deslocamentos atômicos longitudinais e estudaram o número de participação, suas flutuações e também a densidade local dos estados. Eles mostraram numericamente o aparecimento de modos vibracionais estendidos quando $\alpha > \alpha_c$ e que α_c depende da intensidade da desordem.

Em nosso trabalho estudamos a propagação de modos vibracionais em uma rede harmônica bidimensional atômica desordenada. Em nosso modelo as massas dos átomos são desordenadas, entretanto consideramos uma desordem diluída semelhante ao que foi considerado na cadeia unidimensional do modelo encontrado na referência ([Albuquerque et al., 2005](#)). Aqui, as massas são acopladas com as vizinhos através de molas simples, ou seja, vale a lei de Hooke. A desordem diluída é composta por duas sub-redes interpenetrantes, uma composta por massas aleatórias e outras por massas periódicas. Dessa forma, analisamos a propagação de energia ao longo da rede considerado dois tipo de condições iniciais:

i) Injetamos inicialmente um pacote com energia E_o no centro da rede através de uma excitação do tipo deslocamento ou impulso. (ver figura (3.1))

ii) Bombeamos uma das arestas da rede com um pulso acústico contendo todas as frequências vibracionais da rede e analisamos sua propagação, bem como a composição espectral das vibrações que chegam próximo da aresta oposta.

Em geral, nosso estudo consiste em resolver equações clássicas para deslocamentos e velocidades das massas. Como resultados encontramos evidências de que as correlações intrínsecas existentes dentro da distribuição de massa diluída desempenham um papel relevante na propagação da energia vibracional. Nossos cálculos também ajudaram a prever qual região de frequências que melhor se propaga ao longo da rede.

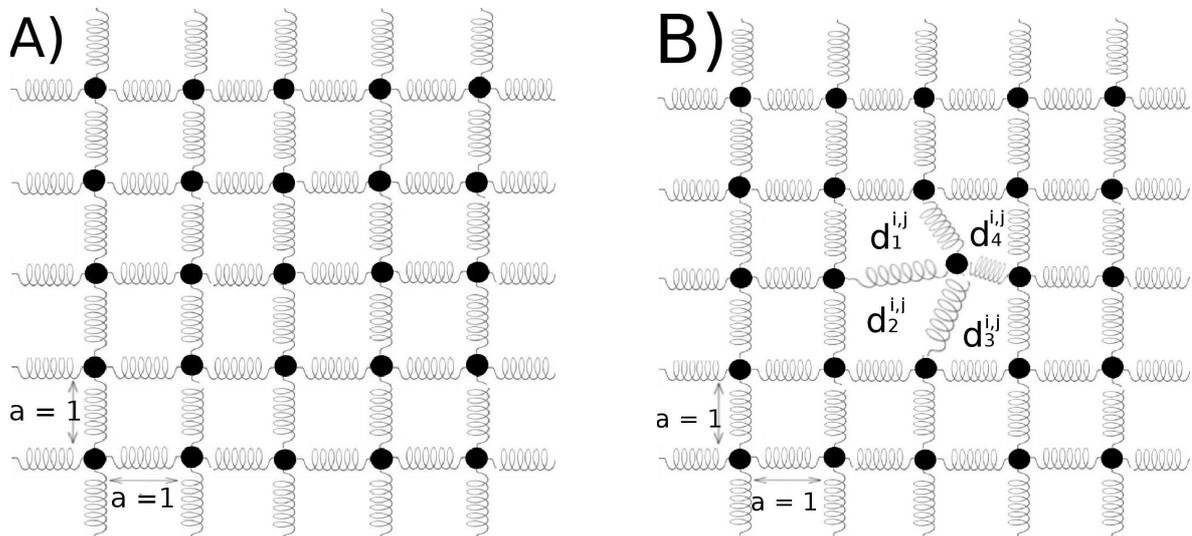
3.2 Modelo e Formalismo

Para entender nosso modelo, vamos considerar a figura (3.1) (A) que representa uma rede harmônica bidimensional. Cada sítio (i, j) contém uma massa $m_{i,j}$ (que será nossa fonte de desordem). Quando o sistema está em repouso as coordenadas x, y de cada massa podem ser definidas como $x_{i,j} = j$ e $y_{i,j} = i$. A distribuição de massa em nosso estudo seguem as seguintes condições:

i) Caso aleatório: Neste caso, a distribuição de massas é definida como, $m_{i,j} = 1 + \eta_{i,j}$, onde $m_{i,j}$ indica as massas dos sítios (i, j) e $\eta_{i,j}$ são números aleatórios distribuídos dentro do intervalo $[0, 1]$;

ii) Caso Diluído 1: A distribuição de massas do caso (i) será modificada seguindo a regra: $m_{i,j} = 1$, para $i = 1, \dots, N$ e j ímpar. Portanto, no caso (ii) a distribuição de massa representa uma linha periódica com valor, $m_{i,j} = 1$, alternando com uma linha aleatória

FIGURA 3.1 – A figura A) Representa uma estrutura atômica bidimensional estática de tamanho $N \times N$, onde cada sítio (i, j) tem uma massa $m_{i,j}$. B) É semelhante a figura A), sendo que a massa central é deslocada de sua posição de equilíbrio. Em nossa abordagem este tipo de condição mostrada na figura (B) representa a condição inicial tipo “deslocamento”. Ou seja, deslocar a rede conforme a figura (B) acaba injetando uma energia E_0 na rede. Outra forma de injetar energia na rede se chama “injeção por impulso”; nesta modalidade a rede permanece seguindo o padrão da figura (A) sendo que a massa central (apenas ela) recebe uma certa velocidade num tempo inicial t_0 .



(conforme foi descrito no caso (i));

iii) Caso Diluído 2: Este caso é semelhante ao caso diluído 1, exceto pelo fato de que a regra de modificação agora é dada por: $m_{i,j} = 1$ para $i = 1, \dots, N$ e $j = 1, 4, 7, 10, 13, 16, \dots$. Ou seja, a distribuição de massas do Caso Diluído 2 é basicamente constituída de uma linha periódica alternada com duas linhas aleatórias.

Na rede harmônica, cada massa e seus quatro vizinhos são acoplados através de uma força harmônica onde k representa a magnitude da constante da mola. Sempre que determinada massa $m_{i,j}$ tem um pequeno deslocamento de sua posição inicial, as quatro molas relacionadas com os quatro primeiros vizinhos mais próximos são deformadas, este fenômeno pode ser observado no lado direito da figura (3.1)(B). Em repouso, a distância média entre cada massa é 1. Após a deformação de um dos sítios, a distância local (i, j) e os quatro primeiros vizinhos mais próximos podem ser medida como:

$$d_1^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i,j} - y_{i+1,j})^2}, \quad (3.1)$$

$$d_2^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i,j} - y_{i,j+1})^2}, \quad (3.2)$$

$$d_3^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i-1,j})^2 + (y_{i,j} - y_{i-1,j})^2} \quad (3.3)$$

e

$$d_4^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i,j-1})^2 + (y_{i,j} - y_{i,j-1})^2}. \quad (3.4)$$

Dessa forma, as forças efetivas que atuam na massa $m_{i,j}$ devido a deformação (figura (3.1)(B)), podem ser escritas como

$$\mathbf{F}^{i,j} = \mathbf{F}_1^{i,j} + \mathbf{F}_2^{i,j} + \mathbf{F}_3^{i,j} + \mathbf{F}_4^{i,j}, \quad (3.5)$$

onde

$$\mathbf{F}_z^{i,j} = k|d_z^{i,j} - 1|\hat{r} \quad \text{com} \quad z = 1, 2, 3, 4. \quad (3.6)$$

A quantidade \hat{r} representa o vetor unitário ao longo da mola z . Gostaria de enfatizar que a direção do vetor \hat{r} depende das distâncias $d_z^{i,j}$, ou seja, $d_z^{i,j} > 1$ o vetor \hat{r} aponta na direção da massa $m_{i,j}$, e se $d_z^{i,j} < 1$, então \hat{r} aponta no sentido oposto a massa $m_{i,j}$. Assim, a dinâmica de energia vibracional é obtida pela resolução das equações clássicas,

$$[\mathbf{F}^{i,j}]_x = m_{i,j} \frac{d^2 x_{i,j}}{dt^2} \quad [\mathbf{F}^{i,j}]_y = m_{i,j} \frac{d^2 y_{i,j}}{dt^2}. \quad (3.7)$$

Em geral, as equações (3.7) podem ser resolvidos da seguinte forma: Cada equação de segunda ordem pode ser separada em duas equações de primeira ordem, assim, $[\mathbf{F}^{i,j}]_x = m_{i,j} \frac{d^2 x_{i,j}}{dt^2}$ pode ser escrita como $[\mathbf{F}^{i,j}]_x = m_{i,j} \frac{dv_{i,j}}{dt}$, com $v_{i,j} = \frac{dx_{i,j}}{dt}$. O mesmo raciocínio é usado para a componente y . Portanto, temos então um conjunto de quatro equações para cada massa (i, j) que pode ser resolvida usando o Método de Euler de segunda ordem (2EM).

Para explicar o método (2EM), usaremos as equações de primeira ordem na direção x . Considerando que conhecemos os valores iniciais de $x_{i,j}(t = 0)$ e $v_x^{i,j}(t = 0)$. Podemos encontrar uma estimativa de primeira ordem para estas quantidades no tempo dt , como:

$$x_{i,j}(t = dt)^1 = x_{i,j}(t = 0) + dt * v_x^{i,j}(t = 0)$$

e

$$v_x^{i,j}(t = dt)^1 = v_x^{i,j}(t = 0) + dt * [F_{i,j}(t = 0)]_x / m_{i,j}.$$

Dessa forma, podemos definir a segunda ordem como:

$$x_{i,j}(t = dt)^2 = x_{i,j}(t = 0) + (dt/2) * (v_x^{i,j}(t = 0) + v_x^{i,j}(t = dt)^1)$$

e

$$v_x^{i,j}(t = dt)^2 = v_x^{i,j}(t = 0) + (dt/2) * ([F_{i,j}(t = 0)]_x + [F_{i,j}(t = dt)]_x) / m_{i,j}.$$

Este mesmo procedimento pode ser usado na direção y e assim solucionar numericamente todo o conjunto de equações de movimento. Em nossos cálculos usamos $dt \approx 5.10^{-3}$ ao longo de todo o intervalo de tempo. Se um pacote de onda localizado inicialmente com energia E_0 for injetado na rede, a energia total ao longo do tempo, $E(t)$, deve ser constante. Portanto, em nossos cálculos a precisão numérica obtida foi suficiente para manter esta conservação da energia ao longo de todo o tempo considerado com tolerância dada por $|1 - E(t)/E_0| < 10^{-10}$. A energia total ao longo do tempo pode ser calculada como $E(t) = \sum_{i,j} h_{i,j}(t)$, onde

$$h_{i,j} = \frac{m_{i,j} * [(v_x^{i,j})^2 + (v_y^{i,j})^2]}{2} + \sum_{z=1}^4 \frac{k|d_z^{i,j} - 1|^2}{4}. \quad (3.8)$$

Logo, a fração de energia em cada massa (i, j) , ou seja, $f^{i,j} = h_{i,j}/E_0$ é usada para estimar a propagação de energia ao longo da cadeia. A dispersão de energia ao longo da cadeia pode ser calculada como:

$$\Sigma(t) = \sqrt{\sum_{i,j} [(x_{i,j} - x_{i0,j0})^2 + (y_{i,j} - y_{i0,j0})^2] f_{i,j}}. \quad (3.9)$$

A quantidade acima é semelhante ao desvio médio quadrático do pacote de onda eletrônico em um sólido desordenado. Como já mencionamos anteriormente o pacote de onda inicial pode ser escolhido de duas formas distintas:

1) excitação por impulso: neste tipo de condição inicial a rede permanece em sua posição de equilíbrio (3.1)(A), entretanto a massa central recebe uma determinada quantidade de impulso(velocidade):

$$v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = \delta_{i,N/2} \delta_{j,N/2}$$

$$x_{i,j}(t=0) = j$$

$$y_{i,j}(t=0) = i$$

2) excitação por deslocamento: Neste caso a velocidade de todas as massas inicialmente é nula, entretanto a massa central é deslocada de sua posição de equilíbrio (3.1)(B). Ma-

tematicamente podemos definir como:

$$x_{i,j} = j + \delta$$

$$y_{i,j} = i + \delta$$

$$v_x^{i,j} = v_x^{i,j} = 0$$

A quantidade dependente do tempo de $\Sigma(t)$ nos fornece uma descrição do fluxo de energia dentro deste modelo e sua relação ao tipo de desordem correlacionado com o qual estamos lidando. Além da análise anterior, também realizamos uma medida direta da propagação de pulso de energia ao longo do sistema. Consideramos que um dos lados da rede é acoplado a alguns osciladores. Estes osciladores injetam um pulso na rede que tem a seguinte configuração:

$$x_{i,0} = \sum_{\omega_n} Z \cos(\omega_n t). \quad (3.10)$$

Onde Z é uma pequena amplitude e ω_n é um conjunto de frequências dentro do intervalo, $[0.05; 5]$. Em linhas gerais, a extremidade esquerda da rede vai receber um pulso que é espectralmente composto de diversas frequências harmônicas. Foi usado cerca de 100 valores de frequência separadas pelo intervalo $\delta\omega = 0.05$ para calcular $x_{i,0}$. Formalmente, a amplitude Z pode assumir qualquer valor menor que um, no entanto, à medida que Z aumenta, a discretização do tempo (dt) precisa diminuir, então o tempo computacional cresce

bastante e se torna complexo terminar as medidas. Dessa forma, escolhemos $Z = 0,001$ e $dt = 5 \times 10^{-3}$. Vale ressaltar que neste trabalho estamos interessados em estudar a propagação da energia ao longo de uma direção; Assim, podemos resolver as equações em uma geometria retangular $L \times N$ (com $N > L$ representando o eixo de propagação). Para analisar a propagação da energia ao longo do sistema, vamos acompanhar a evolução temporal do pulso de energia e monitorar a posição de uma determinada massa perto da extremidade direita rede. Vamos monitorar a quantidade x_{i_0, d_0} onde consideramos $i_0 \approx L/2$ e d_0 um valor próximo de N . Calculamos, então, o deslocamento de massa (i_0, d_0) em relação á condição inicial, isto é, $D_{i_0, d_0}(t) = x_{i_0, d_0}(t) - x_{i_0, d_0}(t = 0)$. Usando esta quantidade podemos calcular a intensidade da transformada de Fourier, $I(\omega) = |FT(D_{i_0, d_0}(t))|$, onde $FT(A)$ representa a transformada de Fourier da função A . intensidade da transformada de Fourier, $I(\omega)$, revela que frequências conseguem se propagar ao longo da rede e definitivamente chegam na extremidade direita do material. Para $I(\omega) = 0$ temos que a frequência ω não atinge o final da rede. Se $I(\omega) > 0$ nossos cálculos sugerem que ω cruzou a rede de um lado para o outro. Ou seja, $I(\omega) > 0$ sugere a possível existência de modos estendidos no modelo.

3.2.1 Resultados e Discussões

Em nosso estudo consideramos três tipo distintos de distribuições de desordem. Vamos relembrar rapidamente cada caso e discutir alguns aspectos importantes:

i) Caso aleatório: Este é o caso onde as massas são completamente aleatórias. Em nossa abordagem consideramos as massas dos átomos neste caso descritas por $m_{i,j} = 1 + \eta_{i,j}$ onde $\eta_{i,j}$ são números aleatórios distribuídos dentro do intervalo $[0, 1]$. Este caso tem uma certa relação direta com a teoria da localização uma vez que temos um sistema de baixa dimensionalidade com desordem intrínseca e sem correlações na desordem. Foi mostrado por diversos autores que sistemas harmônicos de baixa dimensionalidade acabam se comportando de maneira similar ao modelo de Anderson em baixa dimensionalidade e

assim os estados são localizados. O caso harmônico apresenta o modo uniforme ($\omega = 0$) que acaba propagando na rede sem “sentir” a desordem. Mas em linhas gerais, este caso não deve apresentar transporte para $\omega > 0$;

ii) Caso Diluído 1: A distribuição de massas aqui consiste em uma linha periódica com valor $m_{i,j} = 1$ alternando com uma linha aleatória;

iii) Caso Diluído 2: Este caso é semelhante ao caso diluído 1, exceto pelo fato que temos a linha periódica com valor $m_{i,j} = 1$ alternada com duas linhas aleatórias.

Tanto o caso Diluído 1, quanto o caso 2 são estruturas desordenadas com correlações internas. Em linhas gerais, foi mostrado que o modelo de Anderson bidimensionais com correlações de longo alcance apresenta estados metálicos e assim transporte de carga (Moura, 2003). Estruturas harmônicas bidimensionais com desordem diluídas não foram estudadas até o presente momento e nosso objetivo é entender qual o papel deste tipo de correlação frente ao transporte de energia vibracional.

Na figura (3.2), traçamos um resumo dos nossos primeiros resultados para a propagação de energia vibracional usando a medida do desvio médio quadrático equação (3.9). Enfatizamos que a energia inicial foi injetada no sítio (i_c, j_c) por duas maneiras distintas:

A) Excitação por impulso, que corresponde a $v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = \delta_{i,i_c} \delta_{j,j_c}$ e $x_{i,j}(t=0) = j$ e $y_{i,j}(t=0) = i$.

B) Excitação por deslocamento, correspondente a $x_{i,j}(t=0) = j + \delta$ e $y_{i,j}(t=0) = i + \delta$ e $v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = 0$ (em nossos cálculos consideramos $\delta = 0, 1$, contudo, para $\delta < 1$ os cálculos não exibem nenhuma diferença qualitativa. Destacamos que para todas as experiências numéricas relacionadas ao caso aleatório (caso i), consideramos $(i_c, j_c) = (N/2, N/2)$).

Neste nosso primeiro experimento para os casos com desordem diluída (caso 1 e 2) vamos iniciar a rede usando um ponto da sub-rede diluída em torno do centro geométrico da rede. Ou seja, nos casos com desordem diluída os índices (i_c, j_c) representam um sítio qualquer situado perto no centro da rede com $m_{i_c, j_c} = 1$.

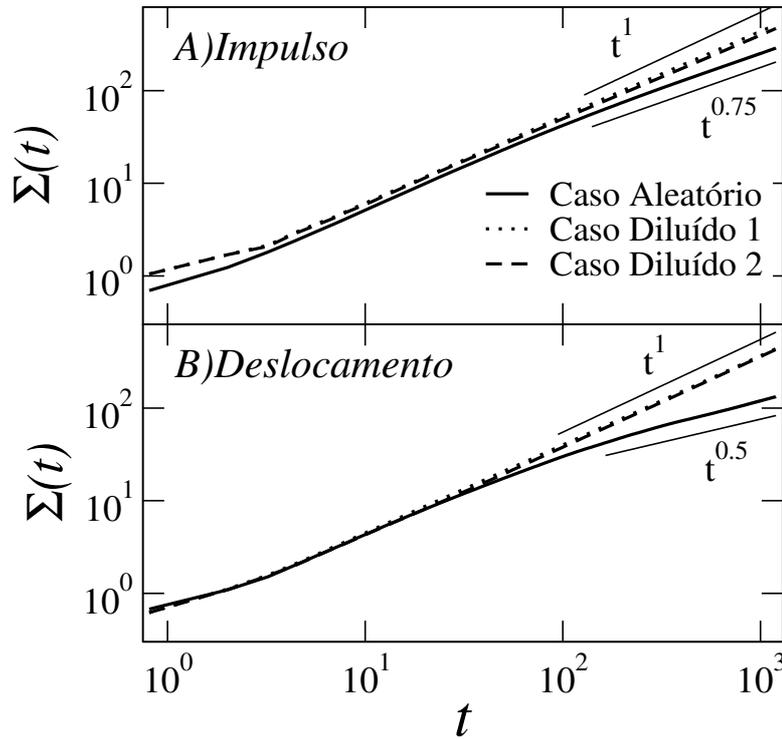
Em relação aos nossos cálculos a respeito da propagação $\Sigma(t)$, usamos uma rede quadrada de tamanho $N \times N$, com $N = 3000$. Analisando a figura (3.2) A) observamos que, para o caso aleatório, a propagação da energia mostrou uma dinâmica super-difusiva, o que é observado com $(\Sigma(t) \propto t^{3/4})$, para a figura (3.2) B), observamos uma dinâmica difusiva que, por sua vez, é caracterizado por, $(\Sigma(t) \propto \sqrt{t})$. A dependência de $\Sigma(t)$ com o tipo de condição inicial, impulso ou deslocamento, em cadeias harmônicas unidimensionais desordenadas também foi estudada nas referências (de Moura et al., 2003; de Moura., 2008). As principais explicações físicas para estes fenômenos são as quantidades de modos de baixa frequência que existem dentro das condições iniciais (de Moura et al., 2003). No caso de uma excitação inicial por impulso, a quantidade de estados de baixa frequência é maior que o caso com deslocamento, por este motivo, a dinâmica da rede causada por impulso é mais rápida. Nos dois casos com desordem diluído, o desvio médio quadrático exibe um comportamento balístico, ou seja, $(\Sigma(t) \propto t^1)$, indicando a presença de modos vibracionais estendidos dentro deste modelo.

Nossos cálculos indicam que os tipos 1 e 2 de desordem diluído promovem uma dinâmica balística. A dinâmica rápida encontrada no caso com desordem diluído, sugere a presença de autoestados vibracionais estendidos. Isso foi investigado usando os cálculos numéricos da quantidade $I(\omega)$.

Na figura (3.3) A), montamos o gráfico de D_{i_0, d_0} versus t para o caso aleatório e os dois tipos de desordem diluída aqui consideradas. Nossos cálculos foram realizado em uma cadeia harmônica retangular de tamanho $(L \times N)$, com $N = 1500$ e $L = 360$. Usamos $i_0 = L/2$, $d_0 \approx 1200$ e consideramos $t = 0$ o tempo tal que $|D_{i_0, d_0}| > 10^{-10}$. Usando os dados de D_{i_0, d_0} versus t , nós calculamos a quantidade $I(\omega)$ através da equação: $I(\omega) = |FT(D_{i_0, d_0}(t))|$, onde $FT(D_{i_0, d_0}(t))$ representa a transformada de Fourier de D_{i_0, d_0} . Os resultados de $I(\omega)$ para os casos aleatórios e diluídos podem ser vistos na figura (3.3).

Nossos cálculos podem ser resumidos da seguinte forma: A função $I(\omega)$ para o caso aleatório é quase nulo em $\omega > 0$ e exibe um pico pronunciado em torno de $\omega = 0$. Esta é um claro sinal de que apenas o caso uniforme, ($\omega = 0$), se propaga ao longo da rede. Tal resultado está de acordo com os resultados anteriores para uma rede harmônica de-

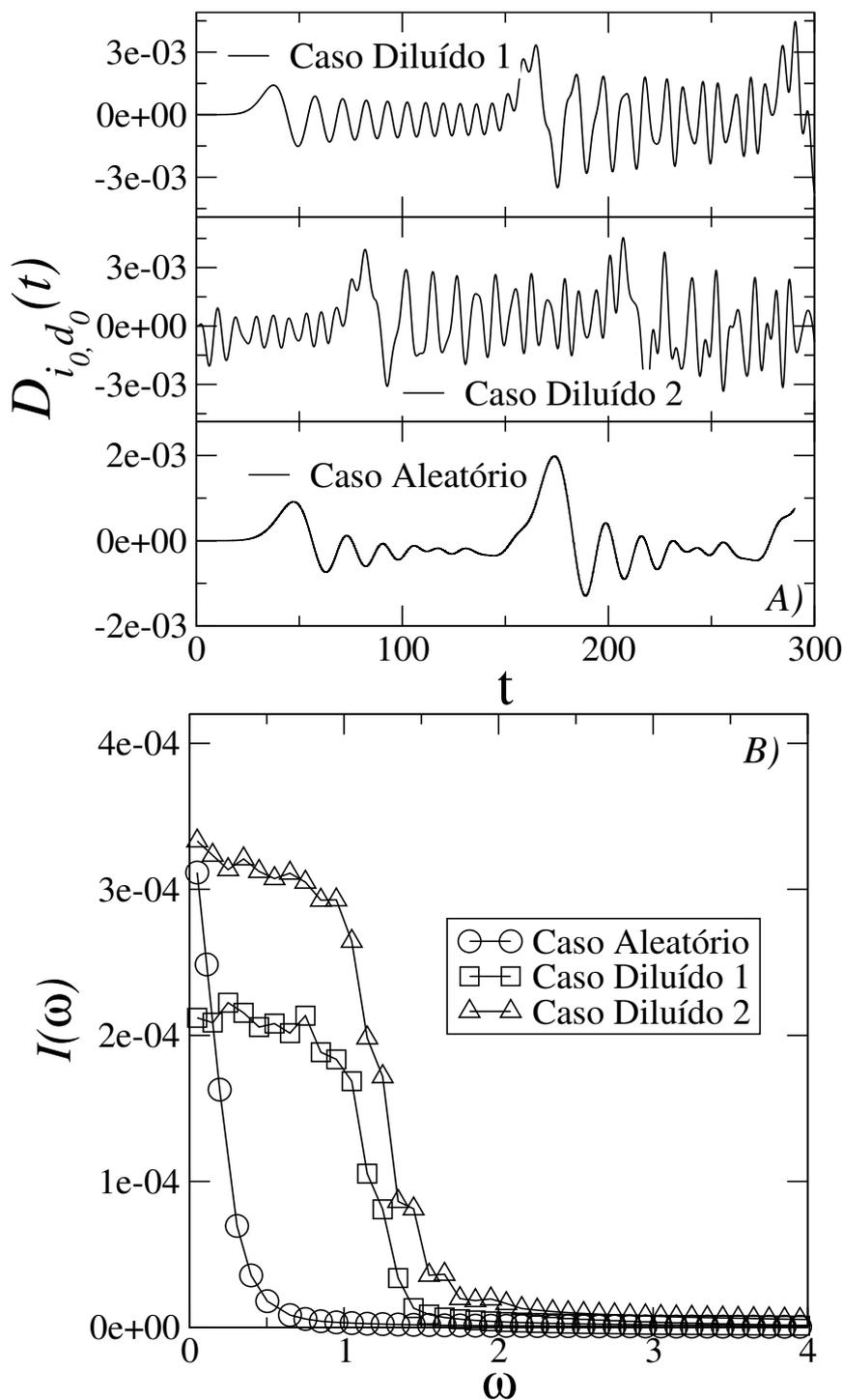
FIGURA 3.2 – A figura representa a dispersão de Energia vibracional $\Sigma(t)$ versus o Tempo t . Em A), temos informação da excitação por impulso, que corresponde a $v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = \delta_{i,i_c} \delta_{j,j_c}$ e $x_{i,j}(t=0) = j$ e $y_{i,j}(t=0) = i$. Em B), temos informação da excitação por deslocamento que corresponde a $x_{i,j}(t=0) = j + \delta$ e $y_{i,j}(t=0) = i + \delta$ e $v_x^{i,j}(t=0) = v_y^{i,j}(t=0) = 0$. Para o caso desordenado (i_c, j_c) foi escolhido como sendo o centro da rede. Para os casos com desordem diluída (i_c, j_c) foi escolhido como sendo um sítio em torno do centro da rede com massa $m_{i_c, j_c} = 1$. Em nossos cálculos consideramos $\delta = 0.1$. Nós observamos que, para o caso aleatório, a propagação da energia mostrou uma dinâmica super-difusiva, o que é observado com $(\Sigma(t) \propto t^{3/4})$, o que por sua vez, é observado na figura (3.2) A). Já na figura (3.2) B), observamos uma dinâmica difusiva, que é caracterizado por $(\Sigma(t) \propto \sqrt{t})$. Além disso, independente do tipo de condição inicial nossos resultados indicam que a desordem diluído promove uma dinâmica balística $\Sigma(t) \propto t^1$.



Fonte: Autor 2017.

sordenada unidimensional (Dean., 1964; Moura, 2003). Em ambos os casos de desordem diluído aqui considerados obtemos uma estrutura nova e interessante. Existe um platô na região de frequências $0 \leq \omega \lesssim 1.2$. Esse resultado sugere que frequências diferentes de zero podem se propagar ao longo deste tipo de redes harmônicas com desordem diluída. Este é um resultado novo e interessante e claramente sugere que ambos os tipos de desordem diluída promove o aparecimento de uma banda de modos vibracionais estendidos. Dentro de nossos cálculos numéricos, observamos que a banda acima mencionada fica aproximadamente dentro do intervalo de frequências $[0, 1.2]$. Portanto, nossos estudos sugerem que este tipo de desordem correlacionada pode promover o aparecimento de

FIGURA 3.3 – A figura representa o Deslocamento de Massa D_{i_0,d_0} versus o Tempo t e a transformada de Fourier, $I(\omega)$ versus ω . A) D_{i_0,d_0} versus t para o caso aleatório e para ambos os tipos de desordem diluída. Os cálculos foram feitos em uma rede harmônica retangular ($L \times N$) com $N = 1500$ e $L = 360$. Em nossos cálculos $i_0 \approx L/2$, $d_0 \approx 1200$. Enfatizamos que consideramos $t = 0$ o tempo em que $|D_{i_0,d_0}| > 10^{-10}$. B) $I(\omega)$ versus ω , com $I(\omega) = |FT(D_{i_0,d_0}(t))|$, onde $FT(D_{i_0,d_0}(t))$ representa a transformada de Fourier para os dados vistos em (A). Para os casos aleatórios, a função $I(\omega)$ é praticamente nula para $\omega > 0$ e apresenta um crescimento para $\omega \approx 0$. Para ambos os tipos de desordem diluída, $I(\omega)$ exibe um platô que sugere a existência de uma banda de modos vibracionais estendidos.

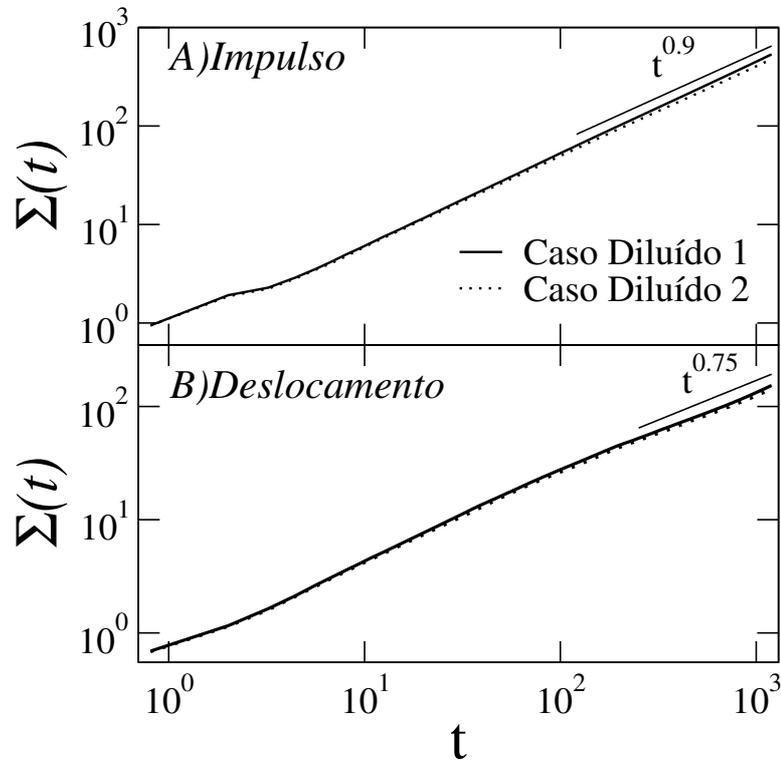


Fonte: Autor 2017.

uma transição de localização-delocalização em redes harmônicas. Os dados apresentados na figura (3.3)(A, B) estão em bom acordo com a dinâmica balística encontrada na figura (3.2).

Antes de nossas considerações finais, discutiremos brevemente a dependência de nossos resultados para a propagação $\Sigma(t)$ com o tipo de condição inicial. Enfatizamos que, para calcular $\Sigma(t)$, injetamos a energia em um sítio inicial (i_c, j_c) perto do centro da rede. No caso de desordem diluída a condição para escolher esta posição foi que a massa do sítio inicial tivesse massa ($m_{i_c, j_c} = 1$) (ou seja, fosse um sítio da rede diluída). Portanto, todas as investigações anteriores sobre $\Sigma(t)$ foram feitas considerando a energia inicial injetada na sub-rede periódica. Mostramos alguns resultados de $\Sigma(t)$ considerando a energia inicial colocada em um sítio (i_c, j_c) pertencente a sub-rede aleatória.

FIGURA 3.4 – A figura representa a dispersão da energia vibracional $\Sigma(t)$ versus o tempo t . Considerando a energia inicial colocada em um sítio i_c, j_c pertencente a sub-estrutura aleatória (isto é, o site inicial (i_c, j_c) é um site próximo ao centro da cadeia com $m_{i_c, j_c} \neq 1$). Os cálculos foram feitos para A) excitação de impulso e B) excitação por deslocamento.



Fonte: Autor 2017.

Na figura (3.4), traçamos $\Sigma(t)$ versus tempo para ambos os tipos de desordem diluída e também A) excitação por impulso e B) excitação por deslocamento. Aparentemente a

dinâmica é mais lenta do que nos casos anteriores (ver figura (3.2)). Obtivemos $\Sigma(t) \propto t^{0.9}$ para o caso com uma excitação de impulso inicial, figura (3.4)(A) e $\Sigma(t) \propto t^{0.75}$ para o caso com uma excitação de deslocamento inicial, figura (3.4)(B). Portanto, nossos resultados sugerem que o tipo de dinâmica em redes harmônicas com desordem diluída depende da natureza da excitação inicial (impulso ou deslocamento) e também do sítio inicial (i_c, j_c) . Quando começamos a dinâmica injetando a energia na sub-rede periódica, obtivemos uma dinâmica balística rápida (tanto para excitação do tipo impulso quanto deslocamento). No entanto, se o pulso de energia inicial for injetado na sub-rede aleatória, o fluxo de energia dentro da rede torna-se mais lento. Este fenômeno também foi observado em sistemas unidimensionais com desordem diluído (Albuquerque et al., 2005; Albuquerque et al., 2006). Em linhas gerais a explicação deste fenômeno é a seguinte: Quando iniciamos a dinâmica em um sítio da rede periódica o pacote inicial é uma combinação espectral de diversos modos. Dentre estes modos existe uma grande fração dos modos vibracionais com grandes comprimentos de localização (Albuquerque et al., 2005; Albuquerque et al., 2006). Portanto, esta grande fração de modos estendidos que existe dentro do pacote inicial acabam dominando a dinâmica e assim o transporte balístico é obtido. Por outro lado, um pacote de energia inicialmente localizado dentro da sub-rede aleatória contém uma fração pequena dos modos vibracionais com grandes comprimentos de localização. Conseqüentemente, a dinâmica energética se torna mais lenta em comparação com o caso em que a dinâmica foi iniciada usando a rede periódica como ponto de partida.

4 Conclusão

O foco central deste estudo foi a investigação teórica das propriedades de transporte em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade. Este tema vem ganhando grande atenção nas últimas décadas dentro da física teórica devido a real possibilidade de se estudar experimentalmente sistemas de baixa dimensionalidade dentro do contexto da nanoeletrônica e/ou bioeletrônica (Albuquerque, 2014). Em nosso trabalho, estudamos a dinâmica eletrônica em uma cadeia não-linear desordenada na presença de interação elétron-fônon e sob efeito do bombeamento de um pulso acústico gaussiano. Investigamos a competição entre diversos elementos: desordem composicional, não linearidade cúbica, interação com os fônons da rede e com um pulso acústico. Em nosso modelo, o elétron está confinado em uma cadeia não-linear desordenada considerando o formalismo proposto por Fermi, Pasta, Ulam. Em nosso formalismo, o efeito da interação elétron-fônon foi considerado assumindo que o hopping eletrônico depende da distância atômica dos sítios vizinhos mais próximos. Consideramos também que a posição do átomo no extremo esquerdo da cadeia recebe um pulso gaussiano. Em nosso formalismo teórico consideramos a dinâmica eletrônica usando um formalismo da Mecânica Quântica e para as vibrações atômicas não-lineares usamos o formalismo de Hamilton (Física Clássica). Nossas medidas físicas foram feitas através de um formalismo numérico que obteve a propagação do pacote de onda eletrônico e as vibrações não-lineares da cadeia desordenada. Aplicamos o método de Euler de segunda ordem para resolver a dinâmica clássica e um formalismo de Taylor para resolver as equações da dinâmica eletrônica. Nosso formalismo numérico se mostrou bem eficiente para resolver o conjunto de equações diferenciais acopladas pertinentes ao modelo quântico/clássico que utilizamos. Inclusive nosso formalismo, para este tipo de problema,

foi mais rápido que métodos usuais como o Runge-Kutta de quarta ordem. Em linhas gerais, nossos cálculos mostraram que é possível o transporte eletrônico em cadeias não-lineares desordenadas usando bombeamento acústico externo como uma “força motora”. Nossos resultados sugerem uma dinâmica eletrônica sub-difusiva mesmo na presença de forças não-lineares. Também fizemos uma breve comparação de nossos resultados com aqueles obtidos para uma cadeia harmônica. Dentro de nossos cálculos, a não-linearidade em nosso formalismo oferece mais dificuldade para o transporte eletrônico.

Também foi feito um estudo a respeito do transporte de energia vibracional em uma rede harmônica desordenada. Em nosso modelo, consideramos que as massas dos átomos são aleatórias e acopladas com as massas vizinhas através de molas simples, ou seja, vale a lei de Hooke. Dessa forma, estudamos o fluxo de energia vibracional em uma rede harmônica com desordem diluída. Aqui, a distribuição de massas foi obtida como uma superposição de uma distribuição de massas aleatórias e periódicas. Usando métodos numéricos, resolvemos as equações clássicas para o deslocamento das massa e das velocidades. Assim, foi analisado o fluxo de energia considerando dois tipos de condições iniciais: i) a evolução temporal de um pacote de energia inicialmente localizado em torno do centro da rede e ii) a propagação de um pulso de uma aresta até a aresta oposta da rede. Nossos cálculos sugerem que o tipo de desordem diluída usado em nossos estudos promove o aparecimento de novos modos vibracionais estendidos. Demonstramos numericamente que a velocidade do fluxo de energia depende do tipo de pulso de energia inicial (se a excitação inicial é feita através de um impulso ou por deslocamento). Também mostramos que o tipo de transporte de energia vibracional depende da posição inicial do pulso. Os resultados indicam que se o pulso de energia inicial estiver localizado na sub-estrutura periódica, a dinâmica é balística. No entanto, se a excitação inicial for totalmente restrita à sub-estrutura aleatória, nossos cálculos apontam para uma propagação super-difusiva.

Em linhas gerais, estudamos dois modelos de baixa dimensionalidade distintos que, apesar de desordenados, podem apresentar propriedades de transporte. Enfatizamos que transporte em baixa dimensionalidade na presença de desordem é uma violação clara da teoria da localização de Anderson. Estes resultados mostram quais mecanismos

podem ser relevantes para se conseguir transporte de carga e/ou de modos vibracionais em materiais amorfos de baixa dimensionalidade. Uma das perspectivas deste estudo consiste, por exemplo, na inclusão de mais elétrons no modelo unidimensional. Desta forma será possível entender a competição entre desordem, interação elétron-fônon, elétron-elétron e campos acústicos externos. Outra perspectiva interessante consiste em incluir cargas na rede harmônica com desordem diluída e entender o transporte de carga neste modelo.

Referências

- J. M. Filardo Bassalo. A crônica da Física do Estado Sólido: II. Teoria dos Metais **Revista Brasileira de Ensino de Física.**, v. 15, n. (1 a 4), p. 139–152, 1993
- J. J. Thomson, M.A., F.R.S. XL. Cathode Rays. **Philosophical Magazine.**, v. 44, n. 5, p. 293–316, 1897
- Drude, P. J. Zur Elektronentheorie der Metalle. **Annalen der Physik**, v. 306, n. 3, p. 566–613, 1900
- Drude, P. J. Zur Elektronentheorie der Metalle; II. Teil. galvanomagnetische und thermomagnetische effecte. **Annalen der Physik**, v. 308, n. 11, p. 369–402, 1900
- Sommerfeld, A. Zur Elektronentheorie der Metalle. **Naturwissenschaften**, v. 15, n. 41, p. 825–832, 1927
- Anderson, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical Review**, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958
- Dias, W. S. **Propriedades de transporte em sistema de baixa dimensionalidade na presença de interação.** Tese (Doutorado) - UFAL, Maceió, 2011.
- da Silva, L. D. **Absorção óptica, efeitos de campos elétricos e interação elétron-fônon em sistemas quaternários com desordem correlacionada.** Dissertação (Mestrado) - UFAL, Maceió, 2014.
- BLOCH, F. Uber die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. **Zeit. Phys.**, v. 52, n. 7-8, p. 555–600, 1928
- Dos Santos B. **Propriedades de Transporte no Modelo de Anderson 1D com Desordem Correlacionada.** Trabalho de conclusão de curso - UFAL, Maceió, 2007.
- de MOURA, F. A. B. F. **Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada.** Tese (Doutorado) - UFPE, Recife, 2003.
- ABRAHAMAS, E.; ANDERSON, P. W.; LICCIARDELLO, D. C.; RAMAKRISHNAN, T. V. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. **Physical Review Letters**, v. 42, n. 10, p. 673–676, 1979

- ALBUQUERQUE, S. S.; DE MOURA, F. A. B. F.; LYRA, M. L. Vibrational modes in harmonic chains with diluted disorder. **Physica A: Statistical**, v. 357, n. 1, p. 165–172, 2005
- ANDERSON, P. W. Spectral Diffusion, Phonons, and Paramagnetic Spin-Lattice Relaxation. **Physical Review**, v. 114, n. 4, p. 1002–1005, 1958
- Thouless, D. J. Maximum Metallic Resistance in Thin Wires. **Physical Review Letters**, v. 39, n. 0, p. 1167–1169, 1977.
- Thouless, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. **Physics Reports**, v. 13, n. 3, p. 93–142, 1974
- Wegner, F. Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge **Zeits. Phys. B Condens. Matt.**, v. 25, n. 4, p. 327–337, 1976.
- da Silva, L. D. Influence of lattice vibrations on the field driven electronic transport in chains with correlated disorder. **Solid State Communications**, v. 248, p. 123–128, 2016.
- DÍAZ, E.; RODRÍGUEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MALYSHEV, V. A. Anomalous optical absorption in a random system with scale-free disorder. **Europhys. Lett.**, v. 72, n. 6, p. 1018 – 1024, 2005.
- De Moura, F. A. B. F. Lett Numerical evidence of electron-soliton dynamics in Fermi Pasta-Ulam disordered chains. **Physica D**, v.253. p. 66 – 72. 2013.
- Manuel G. Velarde. From polaron to solectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v.233, n. 6, p. 1432–1445, 2010
- A. Ranciaro Neto; M.O. Sales; F.A.B.F. de Moura. Influence of lattice vibrations on the field driven electronic transport in chains with correlated disorder. **Solid State Communications**, v. 229, p. 22–27, 2016.
- M.O. Sales; F.A.B.F. de Moura. Electron-soliton dynamics in chains with cubic nonlinearity. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v.26, n.41, 2014.
- WIXFORTH, A.; SCRIBA, J.; WASSERMEIER, M.; KOTTHAUS, J. P. Surface acoustic waves on GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterostructures. **Phys. Rev. B**, v.4, n.11, p. 7884–7887, 1989.
- SIMON, S. H. Coupling of surface acoustic waves to a two-dimensional electron gas. **Nature**, v.54, n.19, p. 13978–13874, 1989.
- R. P. G. McNeil, M. Kataoka, C. J. B. Ford, C. H. W. Barnes, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer & D. A. Ritchie. On-demand single-electron transfer between distant quantum dots. **Phys. Rev. B**, v.477, p. 439–442, 2011.
- NETO, A. R.; SALES, M. O.; de Moura, F. A. B. F. Electronic transport in disordered chains mediated by interactions with acoustic waves. **Soli. Stat. Comm**, v.229, p. 22–27, 2016.

J. M. Shilton, D. R. Mace, V. I. Talyanskii, Y. Galperin, M. Y. Simmons, M. Pepper and D. A. Ritchie, J. On the acoustoelectric current in a one-dimensional channel **Journal of Physics: Condensed Matter**, v.8, n, 24 p. 337–343, 1996.

J. M. Shilton, D. R. Mace, V. I. Talyanskii, Y. Galperin, M. Y. Simmons, M. Pepper and D. A. Ritchie, J. High-frequency single-electron transport in a quasi-one-dimensional GaAs channel induced by surface acoustic waves **J. Phys.: Condens.Matter**, v. 8, n. 38, p. 531, 1996.

F. M. Izrailev, A. A. Kroklin, N. M. Makarav, Anomalous Localization in low-dimensional systems with correlated disorder. **physics Reports**. v.512, p. 125–254, 2012.

A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde. **Physica D: Nonlinear Phenomena**. v.240, n, 24 p. 1954–1959, 2011.

E. Hairer, S. P. Norsett and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (Springer Series in Computational Mathematics); W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Wetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, New York, Third Edition 2007).

F.A.B.F. de Moura, B. Santos, L.P. Viana, M.L. Diffusive, super-diffusive and ballistic transport in the long-range correlated 1D Anderson model **Solid State Communications**. v.138, n, 12 p. 585–589, 2006.

DE MOURA, F. A. B. F. et al. Delocalization in harmonic chains with long-range correlated random masses. **Physical Review B**, v. 68, n. 1, p. 012202-1–012202-4, 2003

FERMI, E.; PASTA, J. R.; ULAM, S. M.S Studies of nonlinear problems. **Lab. Report LA-1940**, v. 266, p. 978–988, 1955

E. Poggi, S. Ruffo; Exact solutions in the FPU oscillator chain. **Physica D.**, 103. p. 251–272, 1995

A. E. B. Costa, F. A. B. F. de Moura. Localization of Acoustic Waves in One-Dimensional Models with Chaotic Elasticity. **World Scienti** v. 22, n. 6 p. 573–580. 2011

ASADA, Y.; SLEVIN, K.; OHTSUKI, T. Numerical estimation of the function in two-dimensional systems with spin-orbit coupling. **Physical Review B**, v. 70, n. 3, p. 35115-1–35115-6, 2004

KITTEL, C. **Introduction To Solid State Physics**. 8rd. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc, 2005.

B. Kramer and A. MacKinnon, Localization: theory and experiment. **Reports on Progress in Physics** v. 56, n. 12, p. 1469–1564 1993

F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Delocalization in the 1D Anderson model with long- range correlated disorder. **Physical Review Letters**. v. 81, n. 0, p. 3735–3738 1998

- F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra, Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. **Europhysics Letters**. v. 66, n. 4, p. 585–591 2004
- F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, Bloch-Like Oscillations in a One-Dimensional Lattice with Long-Range Correlated Disorder. **Physical Review Letters**. v. 91, n. 19, p. (197402-1)(197402-4) 2003
- P. Dean, Vibrations of glass-like disordered chains Proc. **Proceedings of the Physical Society**. v. 85, n. 5, p. 727 1964
- H. Matsuda and K. Ishii, Localization of normal modes and energy transport in the disordered harmonic chain. **Progress of Theoretical Physics Supplement**. v. 45, n. 1, p. 56–86 1970
- K. Ishii, Localization of eigenstates and transport phenomena in the one-dimensional disordered system. **Progress of Theoretical Physics Supplement**. v. 53, n. 1, p. 77–138 1973
- F. Domínguez-Adame, E. Maciá, and A. Sánchez, Delocalized vibrations in classical random chains. **Physical Review Letters**. v. 48, n. 0, p. 6054–6057 1993
- P. K. Datta and K. Kundu, The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains. **Journal of Physics: Condensed Matter**. v. 6, n. 24, p. 4465 1994
- F.A.B.F. de Moura Email end F. Domínguez-Adame, Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. **The European Physical Journal B**. v. 66, p. 165–169 2008
- S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra and E. Lazo, Sensitivity to initial conditions of the wave-packet dynamics in diluted Anderson chains. **Physics Letters A**. v. 355, p. 468–472 2006
- de Moura, F. A. B. F. and Coutinho-Filho, M. D. and Raposo, E. P. and Lyra, M. L, Delocalization in harmonic chains with long-range correlated random masses. **Physical Review B**. v. 68, p. 012202 2003
- SU, W. P. SCHRIEFFER, J. R. HEEGER, A. J. Solitons in Polyacetylene. **Physical Review Letters**. v. 42, n. 25 p. 1698–1701 1979 chrieffe
- EFRANT, S. Raman scattering in $(\text{CH})_x$ and $(\text{CH})_x$ treated with bromine and iodine. **Solid State Commun**. v. 49, n. 3 p. 191–196 1979
- HARADA, I. TASUMI, M. SHIRAKAWA, H. IKEDA, A. RAMAN SPECTRA OF POLYACETYLENE AND HIGHLY CONDUCTING IODINE-DOPED POLYACETYLENE. **Chemistry Letters** v. 7, n. 12 p. 1411–1414, 1978.
- B. J. ALDER, K. J. RUNGE, R. T. SCALETTAR. Variational Monte Carlo Study of an Interacting Electron-Phonon Model. **Physical Review Letters**. v. 79, n. 16 p. 3022–3025, 1997.
- M. G. VELARDE, W. EBELING, A. P. CHETVERIKOV. Controlling fast electron transfer at the nano-scale by solitonic excitations along crystallographic axes. **Eur. Phys. J. B**. v. 85, p. 291-1-291-8, 2012.

- M. TODA. Theory of Nonlinear Lattices. **Springer Series in Solid-State Sciences** v. 20, 2nd. ed. Berlin: Springer-Verlag, New York-London-Paris-Tokyo: Heidelberg, 1989.
- G. GROSSO, G. P. PARRAVICINI. **Solid State Physics**. 2nd. ed., Oxford: Elsevier, 2014.
- STRUTT, J. W. (Lord Rayleigh) On Waves Propagated along the Plane Surface of an Elastic Solid. **Classics of Elastic Wave Theory. Soc. Expl. Geophys.** p. 243-250, 1885.
- A. J. SLOBODNIK. Surface Acoustic Waves and SAW Materials. **Proc. IEEE.** v. 64, n. 5, p. 581-595, 1976.
- A. P. MAYER. Surface acoustic waves in nonlinear elastic media. **physics Reports** v. 256, n. 4-5, p. 237-366, 1995.
- A. EILMES, R. A. RÖMER. Exponents of the localization length in the 2D Anderson model with off-diagonal disorder. **physics Status Solidi B** v. 241, n. 9, p. 2079-2088, 2004.
- L. D. da Silva, J. L. L. dos Santos, A. Ranciaro Neto, M. O. Sales, F. A. B. F. de Moura. One-electron propagation in Fermi, Pasta, Ulam disordered chains with Gaussian acoustic pulse pumping. **World Scientific** v. 20, n. 8, 1750100 (10 pages), 2017.
- ZALLEN, R. The Physics of Amorphous Solids. 1rd. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1998.
- DAVYDOV, A. S. Solitons and Energy Transfer Along Protein Molecules. **J. Theor.Bio.** v. 66, n. 2, p. 379-387, 1977.
- DAVYDOV, A. S. Solitons in Molecular Systems. **Physica D** v. 20, n. 3-4, p. 387-394, 1979.
- DAVYDOV, A. S. The role of solitons in the energy and electron transfer in one-dimensional molecular systems. **Physica D** v. 3, n. 1-2, p. 1-22, 1981.
- DAVYDOV, A. S.; ZOLOTARIUK, A. V. Solitons in molecular systems with nonlinear nearest-neighbour interactions. **Physica Letters. A** v. 94, n. 1, p. 49-51, 1983.
- E.L. Albuquerque, U.L. Fulco, V.N. Freire, E.W.S. Caetano, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura. DNA-based nanobiostructured devices: The role of quasiperiodicity and correlation effects **Physics Reports**. v. 535, n. 4, p. 139-209, 2014.

Apêndice A -

Artigos publicados

One-electron propagation in Fermi, Pasta, Ulam disordered chains with Gaussian acoustic pulse pumping

L. D. da Silva^{*,‡}, J. L. L. dos Santos^{*,§}, A. Ranciaro Neto^{*,†,¶}, M. O. Sales^{*}
and F. A. B. F. de Moura^{*,||}

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

[†]*Faculdade de Economia, Administração e Contabilidade
Universidade Federal de Alagoas
Maceió AL 57072-970, Brazil*

[‡]*leonadekarate@hotmail.com*

[§]*le4ndrolucio@gmail.com*

[¶]*adhranneto@gmail.com*

^{||}*fidelis@fis.ufal.br*

Received 3 April 2017

Accepted 10 July 2017

Published 10 August 2017

In this work, we consider a one-electron moving on a Fermi, Pasta, Ulam disordered chain under effect of electron–phonon interaction and a Gaussian acoustic pulse pumping. We describe electronic dynamics using quantum mechanics formalism and the nonlinear atomic vibrations using standard classical physics. Solving numerical equations related to coupled quantum/classical behavior of this system, we study electronic propagation properties. Our calculations suggest that the acoustic pumping associated with the electron–lattice interaction promote a sub-diffusive electronic dynamics.

Keywords: Sub-diffusive spreading; electron–phonon coupling; wave packet dynamics; nonlinearity.

PACS Nos.: 05.40.–a, 05.60.Cd, 05.10.Gg.

1. Introduction

The problem of electronic dynamics mediated by surface acoustic wave (SAW) has attracted an intense interest.^{1–12} This research field, in broad terms, consists of a combination of solid-state theories including, e.g. Anderson localization theory,¹³ electron–lattice interaction,^{14–16} piezoelectricity⁴ and general solid state physics.^{17–22} An interesting experimental investigation of electronic transport induced by (SAW) was done in Ref. 1. The authors applied a surface acoustic wave through a GaAsAlGaAs two-dimensional (2D) electron gas. Moreover, Ref. 2 also reported

^{||}Corresponding author.

experimental investigation on the electronic flux mediated by high frequency (SAW) in GaAsAlGaAs heterostructures. In Ref. 4, the authors moved a single electron along a wire in a kind of ping-pong game. Moreover, the possibility of using this “controlled motion” in the framework of quantum computing was pointed at, for example, to move a quantum ‘bit’ between two distant places.⁴ This experimental setup consisted of trapping a single electron in a quantum dot and moving that particle along a channel by using a SAW. SAW usage in electron movement and in the construction of quantum bits has attracted interest from some solid-state physics specialists.^{5–11} More recently, the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered harmonic chains under the effect of electron–lattice interaction and an acoustic wave pumping were investigated by numerical calculation.¹² They demonstrated the existence of sub-diffusive electronic transport mediated by the acoustic pumping using that method for solving equations.

In this paper, we investigate the competition between intrinsic cubic nonlinearity, on-site disorder and the pumping of an acoustic pulse. We consider noninteracting electrons moving on a nonlinear Fermi–Pasta–Ulam disordered chain under the effect of electron–phonon interaction and a Gaussian acoustic pulse’s pumping. In our theoretical formalism, we apply quantum mechanics treatment for electron and classical physics for nonlinear atomic vibrations. The dynamics equations are solved numerically: A Taylor formalism is used for electronic propagation and a second-order Euler method is adopted to solve coupled quantum/classical equations. Our calculations suggest that the acoustic pumping associated with the electron–lattice interaction promotes a sub-diffusive electronic dynamics.

2. Model and Formalism

In our model, we consider a one-electron moving in a Fermi–Pasta–Ulam disordered chain of N masses. As previously stated, electronic dynamics is described by quantum Hamiltonian and the lattice vibrations characterized by classical mechanics. Total Hamiltonian is written as $H = H_e + H_{\text{lattice}}$, where^{12,15,23}:

$$\begin{aligned}
 H_e &= \sum_n \{ \epsilon_n d_n^\dagger d_n + V_{n+1,n} (d_{n+1}^\dagger d_n + d_n^\dagger d_{n+1}) \} \\
 H_{\text{lattice}} &= \sum_n \left\{ \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4} [(Q_{n+1} - Q_n)^2 + (Q_n - Q_{n-1})^2] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\eta}{6} [(Q_{n+1} - Q_n)^3 + (Q_n - Q_{n-1})^3] \right\}, \tag{1}
 \end{aligned}$$

where d_n^\dagger and d_n are the creation and annihilation operators for the electron at site n . ϵ_n represents the on-site disorder distribution uniformly chosen within the interval $[-W/2, W/2]$. $V_{n+1,n}$ represents the electron’s kinetic energy (the hopping term). P_n and Q_n are the momentum and displacement of the mass at site (n), respectively. m_n is a disordered distribution of masses generated by the following procedure: $m_n = e^{\rho_n}$, where ρ_n are random numbers uniformly distributed within the interval $[-W/2, W/2]$. η represents the strength of the cubic nonlinearity considered in our

model. The hopping elements $V_{n+1,n}$ depend on the relative distance between two consecutive molecules of the chain: $V_{n+1,n} = -e^{[-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)]}$.¹⁵ The quantity α defines the electron–lattice coupling strength. The time-dependent wave function $|\Phi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ is obtained by numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation. The Wannier amplitudes ($c_n(t)$) evolve in time as ($\hbar = 1$):

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = \epsilon_n c_n(t) - e^{[-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)]} c_{n+1}(t) - e^{[-\alpha(Q_n-Q_{n-1})]} c_{n-1}(t). \quad (2)$$

Lattice equation is written as

$$\begin{aligned} m_n \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} &= (Q_{n+1} - Q_n) - (Q_n - Q_{n-1}) + \eta[(Q_{n+1} - Q_n)^2 - (Q_n - Q_{n-1})^2] \\ &+ \alpha \{ (c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) e^{[-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)]} \\ &- (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) e^{[-\alpha(Q_n-Q_{n-1})]} \}. \end{aligned} \quad (3)$$

We consider the electron initially localized at site $n = 1$, i.e. $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle$, where $c_n(t=0) = \delta_{n,1}$. For $t = 0$, we consider $Q_n(t=0) = \dot{Q}_n(t=0) = 0$, for n within the interval $[1, N]$. In addition, we consider the pumping of an acoustic Gaussian pulse at the extreme left side of chain (i.e. at the site $n = 0$):

$$Q_0(t) = e^{(-t^2/2\Delta t^2)} \cos(\omega t), \quad (4)$$

where ω represents the frequency of the gaussian acoustic pulse and $\Delta t = 1/\Delta\omega = 10$ is the width in time.

In order to solve numerically the quantum equations, we applied a Taylor expansion of time evolution operator $U(\delta t) = \exp(-iH_e \delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} [(-iH_e \delta t)^l] / (l!)$.²⁴ The wave-function at time δt is $|\Phi(\delta t)\rangle = U(\delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. By employing recursion, we obtain the wave-function at time t . For classical equations, we used a prediction-correction second-order method.²⁵ This method consists of two steps: The first step consists of finding a initial prediction $Q_n(\delta t)^*$ at time δt , applying the formula below:

$$Q_n(\delta t)^* \approx Q_n(t=0) + \delta t \left. \frac{dQ_n}{dt} \right|_{t=0}. \quad (5)$$

In the second step, a correction formula is applied in order to get a better approximation to $Q_n(\delta t)$

$$Q_n(\delta t) \approx Q_n(t=0) + \frac{\delta t}{2} \left[\left. \frac{dQ_n}{dt} \right|_{t=0} + \left. \frac{dQ_n^*}{dt} \right|_{\delta t} \right]. \quad (6)$$

This method (Eqs. (5) and (6)) is used recursively to obtain $Q_n(t)$. Our main calculations were carried out using $\delta t = 5 \times 10^{-3}$, and the sum of the Taylor expansion of time evolution operator was truncated on $n_o = 12$. It is worth mentioning that we dealt with border effects by considering a self-expanded chain. This method can be understood as follows: Whenever the probability of finding the electron or the atomic vibration at the right side of the chain exceeds 10^{-20} , 10 new sites will be added

to this position. Thus, we obtained the wave function norm with error $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-10}$ along the entire time interval. It is an important first check for the accuracy of our numerical procedure. Traditionally, the classical equation is solved by another method than the second-order Euler formalism (Eq. (3)). In recognition of this fact, we decided to perform a second check for accuracy employing a standard fourth-order Runge–Kutta (RK4)²⁵ to solve Eqs. (2) and (3). The results obtained using our numerical formalism showed no difference from those obtained using (RK4), a widely used method.

The physical properties are obtained through the calculations of some typical quantities, namely, mean position (centroid), mean square displacement and the Shannon entropy defined as^{23,26}

$$\langle n(t) \rangle = \sum_n (n) |c_n(t)|^2, \quad (7)$$

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n - \langle n(t) \rangle)^2 |c_n(t)|^2} \quad (8)$$

and

$$S(t) = - \sum_n |c_n(t)|^2 \ln[|c_n(t)|^2], \quad (9)$$

respectively. The centroid for a given time t represents the mean position of the electron. The mean square displacement and the Shannon entropy give some estimates of the number of sites in which the wave packet is spread at time t . For extended states in a chain with N sites, we have $\sigma(t \rightarrow \infty) \propto N$ and $S(t \rightarrow \infty) \propto \ln(N)$. For localized states, the situation changes drastically. In general, localized eigenstates occur in systems with uncorrelated disorder. Therefore, within the standard Anderson Localization theory $\sigma(t \rightarrow \infty) \propto l_0$ and $S(t \rightarrow \infty) \propto \ln(l_0)$ where l_0 is close to the largest localization length. Due to the presence of disorder, l_0 is of the order of a few sites and, therefore, both σ and $S(t)$ converge to small constants.

3. Results and Discussion

We start the numerical integration using a small chain (about $N(t = 0) = 200$ sites). During the integration, the $N(t)$ increases until 10^4 sites (or more). In our calculations, we will use $W = 2$. We emphasize that the mean value of the electronic hopping is about 1. Therefore, $W = 2$ represents an amount of disorder at the same order of the band width, i.e. an intermediate disorder in the one-dimensional (1D) model. We also emphasize that we adopted pumping at low-frequencies $\omega \ll 1$. High frequencies do not propagate easily within disordered systems.²⁷ A summary of our calculations for all quantities is shown in Figs. 1(a)–1(f). In plots (a) and (b), we have electronic Centroid, in ((c) and (d)) the mean Square displacement versus time t and

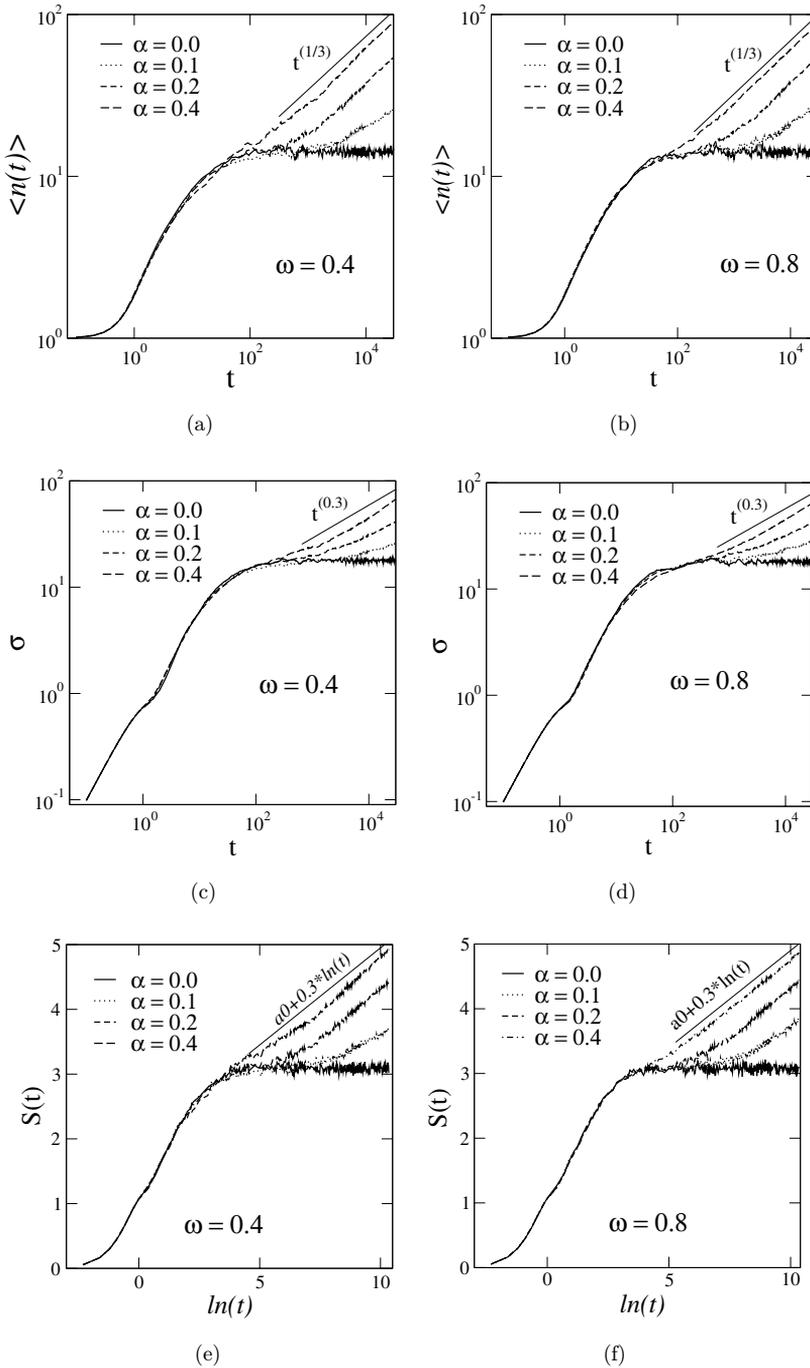


Fig. 1. (a), (b) Electronic centroid, (c), (d) mean square displacement versus time t and (e), (f) Shannon entropy versus $\ln(t)$ for $W = 2$, $\omega = 0.4, 0.8$ and $\alpha = 0., 0.1, 0.2, 0.3$.

in ((e) and (f)) the Shannon Entropy versus $\ln(t)$ for $W = 2$, $\omega = 0.4, 0.8$ and $\alpha = 0., 0.1, 0.2, 0.3$.

We observe that for $\alpha = 0$ all quantities saturate for a long time. It is a direct consequence of the presence of disorder within our model. In 1D systems with uncorrelated disorder, all eigenstates are localized and therefore an initially localized wave-packet evolves to a finite region of the same order of the largest localization length.¹³ The saturated behavior found in centroid, in mean square displacement and in the Shannon entropy is in good agreement with the previous statements.

As the electron-lattice parameter α increases, we notice a radical change of our results (see Figs. 1(e) and 1(f) for $\alpha > 0$). All quantities increase as the time evolves. The time-dependent behavior of $\langle n \rangle$, σ and $S(t)$ suggests that acoustic pumping interacts with electron-lattice coupling in a way to stimulate electronic transport along the chain (acoustic wave produces lattice vibrations on a small number of atoms in a short period of time, which seems to push electron to the right side of the alloy). Within the time-scale computed here, our analysis suggests that the electronic dynamics is sub-diffusive with $\langle n(t) \rangle \propto t^{1/3}$ and $\sigma \propto t^{0.3}$ (the Shannon Entropy follows a similar sub-diffusive trend with $S(t) \approx a_0 + 0.3 \log(t)$). In Figs. 2(a) and 2(b), we plot the wave function $|c_n(t)|^2$ versus n and t for $W = 2$, $\omega = 0.4$ and $\alpha = 0.0$ (a) and $\alpha = 0.4$ (b). This plot gives us a pedagogical overview of the electronic dynamics along the lattice. In the absence of electron-lattice interaction ($\alpha = 0$), electron remains trapped around the initial position ($n = 0$). For $\alpha > 0$, we observe that, despite the presence of uncorrelated disorder within the chain, electronic wave function gets spread. We emphasize that it is a clear breakdown of the standard Anderson localization theory.

Aiming to understand the electronic dynamics and its relation with the lattice dynamics better, we investigate some specificities of the lattice deformation in detail. So, we compute a kind of generalized probability of local deformation f_n . This quantity is obtained as follows: first, we compute the quantity: $x_n = (1 - e^{[-q_n + q_{n-1}]})$.² Second, we normalize x_n to get generalized probability of local deformation f_n , i.e.: $f_n = x_n / \sum_n(x_n)$. With this quantity, we can also compute the mean position of the lattice vibration ($\langle n_v \rangle = \sum_n n f_n$) and also its dispersion

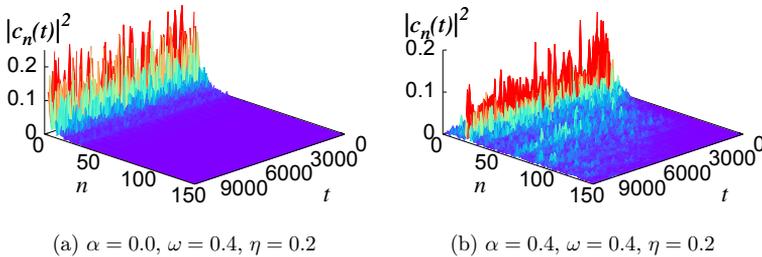


Fig. 2. (Color online) Wave function $|c_n(t)|^2$ versus n and t for $W = 2$, $\eta = 0.2$, $\omega = 0.4$ and $\alpha = 0$ (a) and $\alpha = 0.4$ (b). The presence of electron-lattice interaction promotes the spread of the electronic wave function.

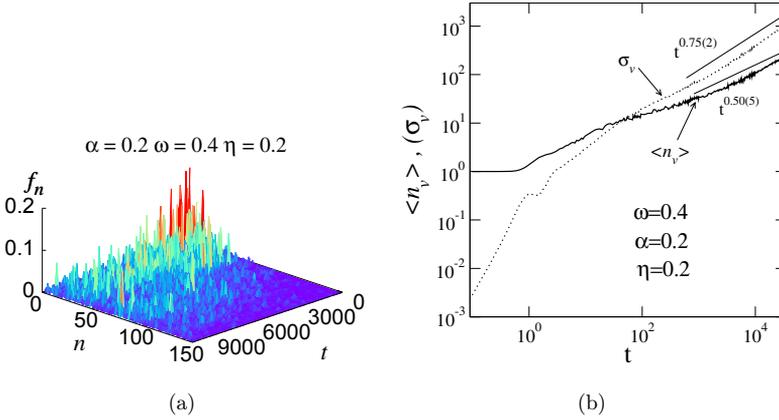


Fig. 3. (Color online) (a) The generalized probability of local deformation f_n computed in a disordered chain with $W = 2$, $\omega = 0.4$ and $\alpha = 0.2$. (b) The mean position of the lattice vibration and its mean square displacement for the same case as in (a).

($\sigma_v = \sqrt{\sum_n (n - \langle n_v \rangle)^2 f_n}$). In Figs. 3(a) and 3(b), we show our numerical analysis about the vibrational energy propagation in this model succinctly. Figure 3(a) has a plot of the generalized probability of local deformation f_n versus n and t for a chain with $W = 2$, $\eta = 0.2$, $\alpha = 0.2$ and $\omega = 0.4$. We see that acoustic pumping clearly propagates along the chain in a similar trend, which was observed in Fig. 2(b). The results for $\langle n_v \rangle$ and σ_v are found in Fig. 3(b). Calculations were done for the same case as in Fig. 3(a). We observed that the mean position of the lattice vibration follows a diffusive dynamics. The mean square displacement of the energy wave-packet has a super-diffusive behavior. These results about the energy dynamics deserve a more detailed discussion. By revisiting Ref. 27, we know that the evolution of a initial localized momentum wave-packet within a classical disordered harmonic chain ($\eta = 0$) follows a similar super-diffusive trend.

First, we emphasize that the acoustic Gaussian pumping used here promotes a kind of continuous injection of momentum for the lattice. Therefore, in spite of the initial condition used here being formally distinct from the momentum injection used in Ref. 27, however, both contain the same nature: injection of momentum. Another important and new information in our calculations is the presence of super-diffusive dynamics in disordered nonlinear chains. We emphasize that our calculations were done for a classical lattice with quadratic and cubic ($\eta > 0$) interaction. Our results suggest that the cubic potential does not change the kind of energy propagation in the approximations used here.

Before the conclusion of our work, we show some brief results about nonlinearity and disorder dependence. In Figs. 4(a) and 4(b), we show our calculations for the mean position $\langle n \rangle$ and the Shannon entropy $S(t)$ versus time t for $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$, $W = 2$ and $\eta = 0, 0.4, 0.8$. Our initial analysis shows that the mean positions and

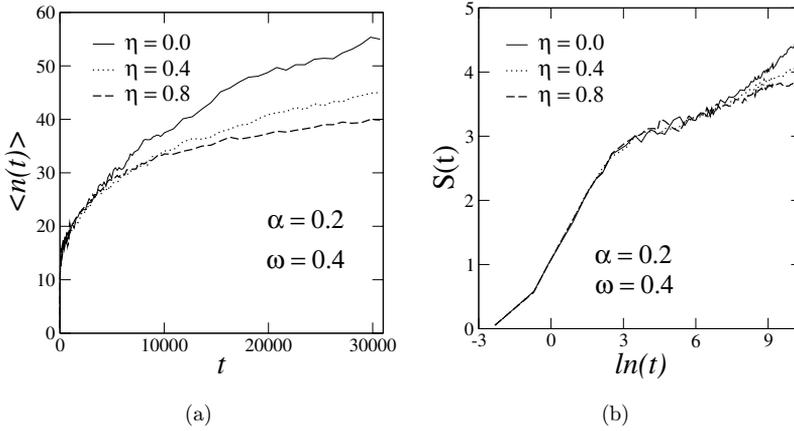


Fig. 4. (a) Mean position $\langle n \rangle$ versus t and (b) Shannon entropy $S(t)$ versus $\ln(t)$ for $\alpha = 0.2$, $\omega = 0.4$, $W = 2$ and $\eta = 0, 0.4, 0.8$.

the Shannon entropy seem to decrease as the η is increased. Based on these calculations, the electron transport mediated by acoustic pumping seems to be more efficient in harmonic ($\eta = 0$) chains. However, we recognize that the range of η , we considered is not sufficiently wide to obtain, indeed, a more conclusive statement. We stress that as the magnitude of the cubic potential is increased within disordered chains, numerical instability increases and therefore it becomes complicated to solve the differential equations. This numerical difficulty could be overcome by using high order methods. However, computational time required to solve coupled equations increases in a considerable manner. We stress that we have used the RK4 method in order to find electronic dynamics. The computation time using RK4 was almost three times the computation time required using the Euler-Taylor formalism. In Figs. 5(a)

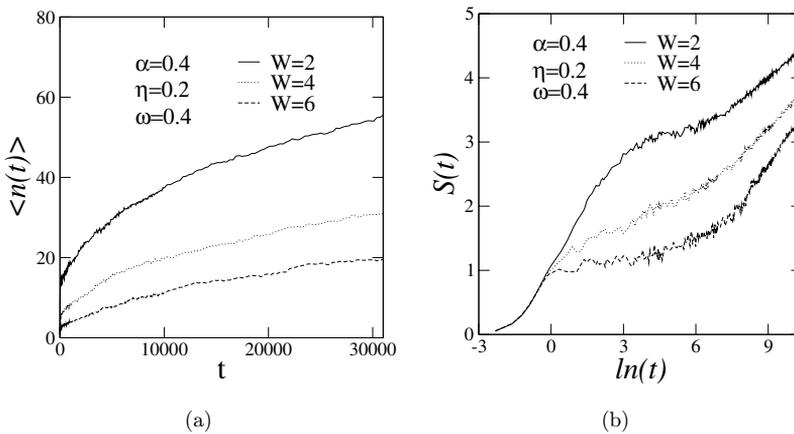


Fig. 5. (a) Mean position $\langle n \rangle$ versus t and (b) Shannon entropy $S(t)$ versus $\ln(t)$ for $\eta = 0.2$, $\omega = 0.4$, $\alpha = 0.4$ and $W = 2, 4, 6$.

and 5(b), we plot the mean position $\langle n \rangle$ and the Shannon entropy $S(t)$ versus time t for $\alpha = 0.4$, $\omega = 0.4$, $\eta = 0.2$ and $W = 2, 4, 6$. We observe clearly that, in spite of the decreasing the magnitude of $\langle n \rangle$ and $S(t)$ with the increasing of W , the main result remains unchanged, i.e. a sub-diffusive dynamics is still obtained. We emphasize again that the strength of disorder we are using here ($W >$ electronic hopping) does not represent a weak disordered regime. In fact, our model with $W \geq 2$ represents a limit with intermediate/strong intrinsic disorder. Therefore, our calculations suggests that the electron–phonon coupling and the pumping of gaussian acoustic pulses can breakdown the Anderson localization in 1D systems even in the presence of an intense amount of disorder.

4. Summary and Conclusions

In this work, we studied the problem of electronic dynamics in a disordered nonlinear chain under effect of a Gaussian wave-packet pumping. By using a simplified model, we had the opportunity to investigate the competition between intrinsic cubic mass–mass interaction, on-site disorder and the pumping of an acoustic pulse. In our model, the electron was restricted to move on a nonlinear Fermi–Pasta–Ulam disordered chain. The effect of electron–phonon interaction was considered by assuming that the electronic hopping depends on the nearest-neighbor atomic distance. We also assumed that the position of the atom at the extreme left side of chain vibrates in a Gaussian pulse. Using this procedure, we simulated the pumping of a external acoustic mode. In our theoretical formalism, the electronic dynamics and the nonlinear atomic vibrations had two distinct formalisms: the former had a quantum mechanics treatment, while the latter was described by standard classic physics framework. We studied the electronic propagation by numerical analysis of the coupled quantum/classical equations. We applied a second-order Euler method to solve the classical dynamics and a Taylor formalism to solve one-electron equations. Our calculations showed that it is possible to move noninteracting electrons in 1D models with nonlinearity and disorder using an external acoustic mode of atomic vibration. We also investigated the vibrational energy dynamics within this mode. Our results suggests a standard super-diffusive dynamics even at the presence of nonlinear forces. We also did a brief comparison of our results with those obtained for an harmonic lattice. In our calculations, nonlinearity brings difficulties to the electronic transport. We hope that these calculations would stimulate further progress in the field of electronic transport mediated by acoustic wave pumping and electron–phonon coupling.

Acknowledgments

The research in Brazil was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES, INCT-Nano(Bio)Simes, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency).

References

1. J. M. Shilton, D. R. Mace, V. I. Talyanskii, Y. Galperin, M. Y. Simmons, M. Pepper and D. A. Ritchie, *J. Phys., Condens. Matter.* **8**, L337 (1996).
2. J. M. Shilton, V. I. Talyanskii, M. Pepper, D. A. Ritchie, J. E. F. Frost, C. J. B. Ford, C. G. Smith and G. A. C. Jones, *J. Phys., Condens. Matter.* **8**, L531 (1996).
3. F. Buscemi, P. Bordone and A. Bertoni, *J. Phys., Condens. Matter.* **21**, 305303 (2009).
4. R. P. G. McNeil, M. Kataoka, C. J. B. Ford, C. H. W. Barnes, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer and D. A. Ritchie, *Nature* **477**, 439 (2011).
5. C. H. W. Barnes, J. M. Shilton and A. M. Robinson, *Phys. Rev. B* **62**, 8410 (2000).
6. H.-Z. Guo, X.-R. Chen and J. Gao, *Phys. Lett. A* **359**, 157160 (2006).
7. M. R. Astley, M. Kataoka, C. J. B. Ford, C. H. W. Barnes, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, D. A. Ritchie and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 156802 (2007).
8. H. Sanada, T. Sogawa, H. Gotoh, K. Onomitsu, M. Kohda, J. Nitta and P. V. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 216602 (2011).
9. M. R. Astley, M. Kataoka, C. J. B. Ford, C. H. W. Barnes, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, D. A. Ritchie and M. Pepper, *Physica E* **40**, 1136 (2008).
10. M. Rosini et al., *J. Comput. Electron* **3**, 443 (2004).
11. M. R. Astley, M. Kataoka, C. J. B. Ford, C. H. W. Barnes, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, D. A. Ritchie and M. Pepper, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 18 (2015).
12. A. Ranciaro Neto, M. O. Sales and F. A. B. F. de Moura, *Solid State Commun.* **229**, 22 (2016).
13. F. M. Izrailev, A. A. Krokhin and N. M. Makarov, *Phys. Rep.* **512**, 125 (2012).
14. W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979). W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, *Phys. Rev. B* **22**, 2099 (1980); A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer and W.-P. Su, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 781 (1988).
15. A. P. Chetverikov, W. Ebeling and M. G. Velarde, *Physica D* **240**, 1954 (2011); V. A. Makarov, M. G. Velarde, A. P. Chetverikov and W. Ebeling, *Phys. Rev. E* **73**, 066626 (2006); A. P. Chetverikov, W. Ebeling and M. G. Velarde, *Eur. Phys. J. B* **80**, 137 (2011); M. G. Velarde, Chetverikov, A. P. Chetverikov, W. Ebeling, E. G. Wilson and K. J. Donovan, *Europhys. Lett.* **168**, 27004 (2014).
16. F. A. B. F. de Moura, *Physica D* **253**, 66 (2013).
17. G. Bianconi, *Europhys. Lett.* **101**, 26003 (2013).
18. I. N. de Oliveira, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, J. S. Andrade, Jr. and E. L. Albuquerque, *Phys. Rev. E* **81**, 030104(R) (2010).
19. I. N. de Oliveira, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, J. S. Andrade, Jr. and E. L. Albuquerque, *Phys. Rev. E* **79**, 016104 (2009).
20. P. A. Morais, J. S. Andrade, Jr., E. M. Nascimento and M. L. Lyra, *Phys. Rev. E* **84**, 041110 (2011).
21. A. J. Martínez and M. I. Molina, *J. Phys. A, Math. Theor.* **45**, 275204 (2012).
22. A. M. C. Souza, R. F. S. Andrade, N. A. M. Arajo, A. Vezzani and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. E* **95**, 042130 (2017).
23. M. O. Sales and F. A. B. F. de Moura, *J. Phys., Condens. Matter.* **26**, 415401 (2014).
24. F. A. B. F. de Moura, *Int. J. M. Phys. C* **22**, 63 (2011).
25. E. Hairer, S. P. Nørsett and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (Springer Series in Computational Mathematics); W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3rd edn. (Cambridge University Press, New York, 2007).
26. F. A. B. F. de Moura, B. Santos, L. P. Viana, M. L. Lyra and F. A. B. F. de Moura, *Solid State Commun* **138**, 585 (2006).
27. F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **68**, 012202 (2003); P. K. Datta and K. Kundu, *Phys. Rev. B* **51**, 6287 (1995).

Energy Propagation in Classical Harmonic Lattices with Diluted Disorder

L. D. da Silva¹ · A. Ranciaro Neto^{1,2} · J. L. L. dos Santos¹ · F. A. B. F. de Moura¹

Received: 7 July 2017 / Published online: 10 October 2017
© Sociedade Brasileira de Física 2017

Abstract We consider the problem of a harmonic lattice in which masses' distribution is a superposition of a random and a periodic distribution. Classical equations for the mass displacement and velocities are solved using a second-order Euler formalism. Energy flow was investigated on two distinct experiments: (i) We injected an initial wave-packet with energy E_0 and analyzed the dynamics of the resulting energy pulse; (ii) we pumped one of the sides of the lattice with a external signal and then we observed the propagation of the pulse until the other side of chain. Our calculations suggest that the diluted disordered mass distribution promotes energy dynamics at high frequency limit.

Keywords Localization · Diluted disorder · Propagation · Harmonic lattice

1 Introduction

According to Anderson localization theory, extended eigenstates are absent in low-dimensional disordered systems with uncorrelated disorder [1–3]. Exceptions were demonstrated some years ago in case of correlated disorder [4–24]. The localization theory can also be applied to general phonons propagation. Most vibrational modes of

one-dimensional (1D) harmonic chains with a random sequence of masses are localized [25]. It was also demonstrated that there are a few low-frequency modes not localized, whose number is of the order of \sqrt{N} , N being the number of masses in the chain [25–27]. Other studies about correlated disorder in classical one-dimensional harmonic lattices were made in the past. In refs. [28, 29], authors showed that short-range correlations promote the appearance of new non-scattered vibrational modes.

Among the models with short-range correlation, 1D chains with diluted disorder also support extended eigenstates [30]. The diluted disorder consists of two interpenetrating sub-lattices, one composed of random masses and the other being periodic. It was proved that special resonant energies appear, giving rise to a set of extended states. Harmonic chains with long-range correlated disorder were investigated in ref. [31]. In that case, extended states exist in the high frequency region.

Most part of literature related to vibrational modes in disordered harmonic systems, presents the dimensionality as a big problem. In general, the authors prefer investigate one-dimensional disordered chains. Two-dimensional harmonic lattices with correlated disorder is an almost unknown field. In ref. [32], the nature of the vibrational modes in a two-dimensional harmonic lattice with long-range correlation was investigated. The random masses distribution exhibited a power-law spectral density $S(k) \sim 1/k^\alpha$. Authors considered only longitudinal atomic displacements and computed the participation number, its fluctuations and also the local density of states. They showed numerical proof that extended vibrational modes appear when $\alpha > \alpha_c$ and that α_c depends on the magnitude of disorder.

In this work, we consider the problem of a harmonic 2D lattice with diluted disorder. In our model, the distribution of masses is a generalization of the 1D diluted model

✉ F. A. B. F. de Moura
fidelis@fis.ufal.br

¹ Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

² Faculdade de Economia, Administração e Contabilidade, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

considered in ref. [30], i.e., a superposition of a random and a periodic mass distribution. Two distinct types of numerical simulations were performed in that system: (i) We inject an initial wave-packet with energy E_0 and then we observe energy pulse's dynamics; (ii) by pumping one of the sides of the lattice with a external signal, we analyze the propagation of this pulse until it reaches the other side of lattice. Broadly, our procedure consists of solving classical equations for masses displacements and velocities. In the end, we found evidence that intrinsic correlations which exist within the diluted mass distribution play a relevant role in the energy propagation. Our calculations also helped to predict the frequency region that propagates along the lattice.

2 Model and Numerical Calculations

In our model, we consider a two-dimensional harmonic lattice (see Fig. 1a). Each site (i, j) represents an atom with mass $m_{i,j}$. When the system is at rest, the x and y coordinates may be, respectively, set to $x_{i,j} = j$ e $y_{i,j} = i$ (in units of the lattice spacing $a = 1$). Masses distributions which were chosen for our studies in this paper are described as follows: i) "Random case": this kind of distribution is defined as $m_{i,j} = 1 + \eta_{i,j}$, where $m_{i,j}$ is a mass on site i, j and $\eta_{i,j}$ is a random number uniformly distributed within the interval $[0, 1]$; ii) "Diluted case 1": the mass distribution of case i) is modified by the following the rule: $m_{i,j} = 1$ for $i = 1, \dots, N$ and j is odd. Therefore, the case (ii) represent a mass distribution with a line periodic (with value $m_{i,j} = 1$) alternating with random lines; iii) The "Diluted case 2" is similar to "Diluted case 1" (case ii) except that the position of periodic lines changes to : $m_{i,j} = 1$ for $i = 1, \dots, N$ and $j = 1, 4, 7, 10, 13, 16, \dots$. Each mass and its four neighbors are coupled through a harmonic force. $k = 1$ represents the magnitude of the spring constant. Whenever a given mass ($m_{i,j}$) has small displacement from its initial position, the four springs related with the four first nearest neighbors are deformed (see Fig. 1b a pedagogical exhibition of this phenomenon). At rest, the mean distance between each mass is 1. The distance between the site (i, j) and its four first nearest neighbors after the deformation can be measured as:

$$d_1^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i+1,j})^2 - (y_{i,j} - y_{i+1,j})^2}, \tag{1}$$

$$d_2^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i,j+1})^2 - (y_{i,j} - y_{i,j+1})^2}, \tag{2}$$

$$d_3^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i-1,j})^2 - (y_{i,j} - y_{i-1,j})^2} \tag{3}$$

and

$$d_4^{i,j} = \sqrt{(x_{i,j} - x_{i,j-1})^2 - (y_{i,j} - y_{i,j-1})^2}. \tag{4}$$

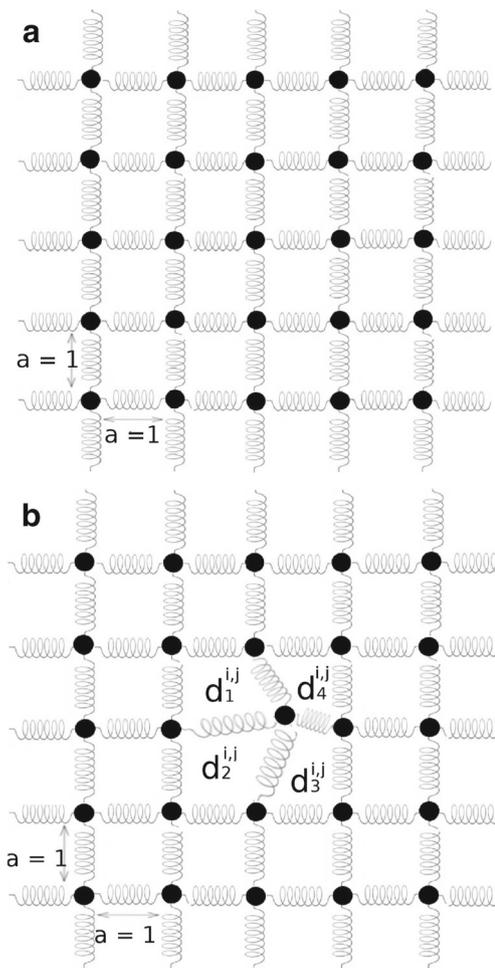


Fig. 1 **a** Two-dimensional harmonic lattice where each site (i, j) represents an atom with mass $m_{i,j}$. **b** Pedagogical exhibition of the deformed harmonic lattice after a given mass ($m_{i,j}$) is moved from its initial position

Therefore, the effective force on mass ($m_{i,j}$) can be computed as $\mathbf{F}^{i,j} = \mathbf{F}_1^{i,j} + \mathbf{F}_2^{i,j} + \mathbf{F}_3^{i,j} + \mathbf{F}_4^{i,j}$ where $\mathbf{F}_z^{i,j} = k|d_z^{i,j} - 1|\hat{r}_z$ with $z = 1, 2, 3, 4$. \hat{r}_z is a unity vector along the spring z . We emphasize that the direction of \hat{r}_z depends on the distance $d_z^{i,j}$: if $d_z^{i,j} > 1$ the vector \hat{r}_z points to the direction of mass i, j ; on the contrary, if $d_z^{i,j} < 1$, then \hat{r}_z points to the opposite direction of mass i, j . The vibrational energy dynamics is obtained by solving the classical equations :

$$[\mathbf{F}^{i,j}]_x = m_{i,j} \frac{d^2 x_{i,j}}{dt^2} \tag{5}$$

and

$$[\mathbf{F}^{i,j}]_y = m_{i,j} \frac{d^2 y_{i,j}}{dt^2} \tag{6}$$

In general, (5) and (6) can be solved as follows: each second order equation can be separated in two first order equations (e.g. the (5) is written as : $[\mathbf{F}^{i,j}]_x = m_{i,j} \frac{dv_x^{i,j}}{dt}$ and $v_x^{i,j} =$

$\frac{dx_{i,j}}{dt}$; the same is done for the (6)). Therefore, we have a set of four equations for each mass (i, j) which can be solved using a second order Euler method (2EM).

In order to explain the (2EM) method, we will use, as example, the first-order equations for the x direction. Considering we know the initial value of $x_{i,j}(t = 0)$ and $v_x^{i,j}(t = 0)$, we find a first-order estimation for these quantities at time dt as: $x_{i,j}(t = dt)^1 = x_{i,j}(t = 0) + dt * v_x^{i,j}(t = 0)$ and $v_x^{i,j}(t = dt)^1 = v_x^{i,j}(t = 0) + dt * [F^{i,j}(t = 0)]_x / m_{i,j}$. The second-order formula for these quantities is written as: $x_{i,j}(t = dt)^2 = x_{i,j}(t = 0) + (dt/2) * (v_x^{i,j}(t = 0) + v_x^{i,j}(t = dt)^1)$ and $v_x^{i,j}(t = dt)^2 = v_x^{i,j}(t = 0) + (dt/2) * ([F^{i,j}(t = 0)]_x + [F^{i,j}(t = dt)]_x) / m_{i,j}$. The same second-order procedure may be used for the y direction. In our calculations, we use $dt \approx 5 \times 10^{-3}$ along the entire time interval. We also check numerical accuracy of our procedure. It was done by monitoring the temporal evolution of the total energy contained within the lattice. If an initial localized wave-packet with energy E_0 was injected into the lattice, the time-dependent total energy $E(t)$ should be constant along the time; we find that $|1 - E(t)/E_0| < 10^{-10}$ within the entire interval. The time-dependent energy may be computed as $E(t) = \sum_{i,j} h_{i,j}(t)$ where

$$h_{i,j}(t) = \frac{m_{i,j} * [(v_x^{i,j})^2 + (v_y^{i,j})^2]}{2} + \sum_{z=1}^4 \frac{k|d_z^{i,j} - 1|^2}{4} \quad (7)$$

Our first analysis consists of injecting an initial wave-packet with energy E_0 close to the center of the lattice and then calculate its spread with time. The fraction of the initial energy on the mass (i, j) (i.e., $f^{i,j} = h_{i,j}/E_0$) is used to estimate the spread of energy within the lattice.

$$\Sigma(t) = \sqrt{\sum_{i,j} [(x_{i,j} - x_{i_0,j_0})^2 + (y_{i,j} - y_{i_0,j_0})^2] f^{i,j}} \quad (8)$$

The quantity Σ has the same status of the root-mean-square displacement of the wave packet of an electron in a solid. Here, x_{i_0,j_0} and y_{i_0,j_0} represent the coordinates of the site in which energy is initially injected into the lattice. The time-dependent behavior of $\Sigma(t)$ provides a description of the energy flow within this model and its relationship with the type of correlated disorder that we are dealing with. We emphasize that $\Sigma(t)$ is measured in units of the lattice spacing $a = 1$.

Beyond previous analysis, we also perform a direct measure of the energy pulse propagation along the system. We consider that one of the sides of the lattice is coupled to some oscillators. These oscillators inject a pulse into the lattice such as:

$$x_{i,0} = \sum_{\omega_n} Z \cos(\omega_n t) \quad (9)$$

where Z is a small amplitude and ω_n is a set of frequencies within the interval $[0.05, 5]$. We use about 100 frequency values separated by $\delta\omega = 0.05$ in order to calculate $x_{i,0}$. Formally, the amplitude Z could be any value less than one. However, as Z is increased, the discretization in time (dt) needs to decrease then, the computational time diverges. So, we choose $Z = 0.001$ and $dt = 5 \times 10^{-3}$. We stress that, within this experiment, we are interested to study the energy propagation along one direction; thus we can solve the equations in a rectangular geometry $L \times N$ (with $N > L$ representing the propagation axis). In order to analyze the energy propagation along the system, we follow the time-evolution of energy pulse by monitoring the mass position x_{i_0,d_0} . In our calculations, $i_0 \approx L/2$ and d_0 is close to N . Hence, x_{i_0,d_0} represent the position of a mass far from the lattice's side that received the energy pumping. We calculate the displacement of mass (i_0, d_0) relative to the initial condition i.e. $D_{i_0,d_0}(t) = x_{i_0,d_0}(t) - x_{i_0,d_0}(t = 0)$ (in units of the lattice spacing $a = 1$). Using this quantity, we compute $I(\omega) = |FT(D_{i_0,d_0}(t))|$, where $FT(A)$ represent the Fourier transform of function A . $I(\omega)$ reveals some information about the frequencies that propagate along the chain. When $I(\omega) = 0$, it advocates that frequency ω does not reach the end of lattice (position d_0). If $I(\omega) > 0$, our calculations indicate that the frequency ω crossed the lattice from one side to another. In other words, $I(\omega) > 0$ suggests propagation and a possible existence of extended modes.

3 Results and Discussion

We emphasize that we investigated vibrational dynamics in a two-dimensional disordered harmonic lattice. We considered three distinct types of distribution of masses: (i) "Random case": the masses distribution is defined as $m_{i,j} = 1 + \eta_{i,j}$ where $\eta_{i,j}$ is a random number uniformly distributed within the interval $[0, 1]$; (ii) "Diluted case 1": the mass distribution of case (i) is modified by following the rule: $m_{i,j} = 1$ for $i = 1, \dots, N$ and j is odd. (iii) The "Diluted case 2" is similar to "Diluted case 1" (case ii) except that the position of periodic lines changes to: $m_{i,j} = 1$ for $i = 1, \dots, N$ and $j = 1, 4, 7, 10, 13, 16, \dots$. In Fig. 2, we plot a summary of our main results for the spread of the energy distribution (8) versus time t . We stress that initial vibrational energy input was injected on site i_0, j_0 according to two quite distinct classes: (A) *Impulse* excitations corresponding to $v_x^{i,j}(t = 0) = v_y^{i,j}(t = 0) = \delta_{i,i_0} \delta_{j,j_0}$ and $x_{i,j}(t = 0) = j$ and $y_{i,j}(t = 0) = i$. (B) *displacement* excitations, i.e., $x_{i,j}(t = 0) = j + \Delta \delta_{i,i_0} \delta_{j,j_0}$, $y_{i,j}(t = 0) = i + \Delta \delta_{i,i_0} \delta_{j,j_0}$ and $v_x^{i,j}(t = 0) = v_y^{i,j}(t = 0) = 0$ (in our calculations, we used $\Delta = 0.1$, however, for $\Delta < 1$, calculations did not exhibit any qualitative difference). Also, for all numerical calculations related to the random case (case i),

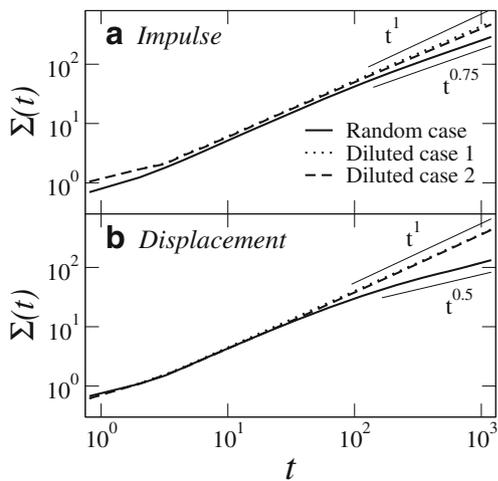


Fig. 2 Energy spread distribution $\Sigma(t)$ versus time t for (a) *Impulse* excitations that correspond to $v_x^{i,j}(t = 0) = v_y^{i,j}(t = 0) = \delta_{i,i_0}\delta_{j,j_0}$ and $x_{i,j}(t = 0) = j$ and $y_{i,j}(t = 0) = i$ and (b) *displacement* excitations that correspond to $x_{i,j}(t = 0) = j + \Delta\delta_{i,i_0}\delta_{j,j_0}$, $y_{i,j}(t = 0) = i + \Delta\delta_{i,i_0}\delta_{j,j_0}$ and $v_x^{i,j}(t = 0) = v_y^{i,j}(t = 0) = 0$ (here we used $\Delta = 0.1$). The initial wave-packet was localized on a site (i_0, j_0) close to the center of lattice with $m_{i_0, j_0} = 1$. We observe that, for the random case, standard deviation of energy follows a super diffusive dynamics ($\Sigma(t) \propto t^{3/4}$) in (a) and a diffusive one ($\Sigma(t) \propto \sqrt{t}$) in (b). Moreover, for this kind of initial condition, the diluted disorder promotes a ballistic dynamics ($\Sigma(t) \propto t^1$)

we considered $(i_0, j_0) = (N/2, N/2)$. For the diluted cases (case ii and iii), the site (i_0, j_0) represents a site close to the center of lattice $((N/2, N/2))$ such that $m_{i_0, j_0} = 1$. Calculations of the spread $\Sigma(t)$ were done for a square lattice with $N \times N = 3000 \times 3000$. By analyzing Fig. 2, we observed that, for the random case, the spread of energy showed a super diffusive dynamics ($\Sigma(t) \propto t^{3/4}$) in Fig. 2a and a diffusive one ($\Sigma(t) \propto \sqrt{t}$) in Fig. 2b. The dependence of $\Sigma(t)$ with the type of initial condition (impulse or displacement) it was also obtained in disordered one-dimensional harmonic chains [31, 32]. The main physical explanations for this phenomena is the amount of low-frequency modes that exist within the initial conditions [31]. In the case with an initial impulse excitation, the amount of low-frequency states is larger than the case with initial displacement, hence the dynamics is faster. In both cases with diluted disorder, the mean square displacement exhibits a ballistic behavior ($\Sigma(t) \propto t$), thus indicating the presence of extended vibrational modes within this two-dimensional disordered harmonic model. Our calculations indicate that types 1 and 2 of diluted disorder promotes the ballistic dynamics. The fast dynamics found in the case with diluted disorder suggest the presence of extended vibrational eigenstates. We investigated this point using the numerical calculations of quantity $I(\omega)$. In Fig. 3a, we plot D_{i_0, d_0} versus t for the random case and both types of diluted disorder. Calculations were done in a rectangular $(L \times N)$ harmonic lattice with

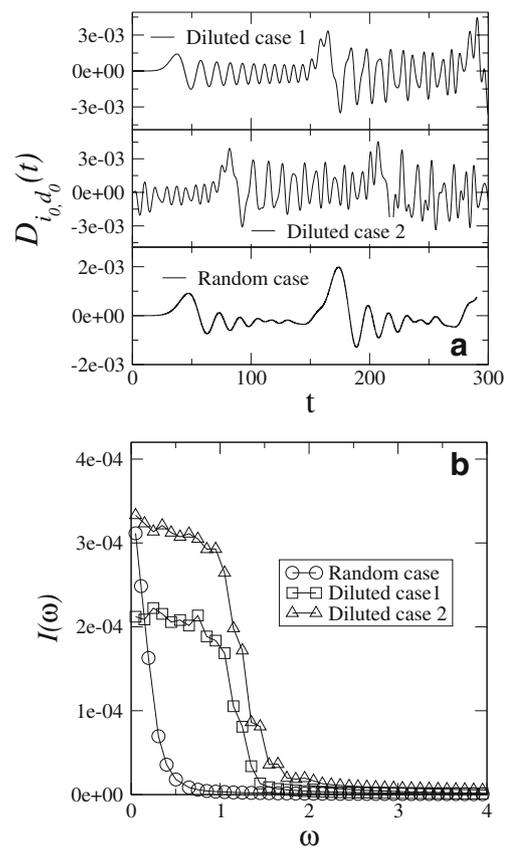


Fig. 3 a D_{i_0, d_0} versus t for the random case and for both types of diluted disorder. Calculations were done in a rectangular $(L \times N)$ harmonic lattice with $N = 1500$ and $L = 360$. In our calculations $i_0 \approx L/2$ and $d_0 \approx 1200$. We emphasize that we consider $t = 0$ the time in which that $|D_{i_0, d_0}| > 10^{-10}$. B) $I(\omega) = |FT(D_{i_0, d_0}(t))|$ where $FT(D_{i_0, d_0}(t))$ represent the Fourier transform of $D_{i_0, d_0}(t)$ for the data in (a). For the random case, the function $I(\omega)$ is null for $\omega > 0$ and it is nonvanishing for $\omega \approx 0$. For both types of diluted disorder, $I(\omega)$ exhibits a plateau that suggests the existence of a band of extended vibrational modes

$N = 1500$ and $L = 360$. In our calculations $i_0 \approx L/2$ and $d_0 \approx 1200$. We emphasize that, in Fig. 3a, we consider $t = 0$ the time in which that $|D_{i_0, d_0}| > 10^{-10}$. By using the time-evolution of D_{i_0, d_0} , we calculated the quantity $I(\omega)$ as $I(\omega) = |FT(D_{i_0, d_0}(t))|$, where $FT(D_{i_0, d_0}(t))$ represents the Fourier transform of $D_{i_0, d_0}(t)$. The results of $I(\omega)$ for the random case and also the diluted case types 1 and 2 can be found in Fig. 3b. Our calculations are summarized as follows: The function $I(\omega)$ for the random case is almost null for $\omega > 0$ and exhibits a pronounced peak around $\omega = 0$. This is a clear signature that only the modes around the uniform mode ($\omega = 0$) propagates along the lattice. This result is in good agreement with the previous calculations for a one-dimensional disordered harmonic chain [25, 29]. The uniform mode ($\omega = 0$) in a $1d$ harmonic disordered chain represents a mode without spring deformation, so it has

divergent wave-length and, also, it is not affected by the disorder propagating through the system [25, 29]. Conversely, harmonic modes with $\omega > 0$ cannot propagate along disordered harmonic chain. It happens due to the intrinsic disorder distribution. Our calculations of $I(\omega)$ suggest the same behavior occurs for the $2d$ disordered harmonic case. The diluted disorder 1 and 2 exhibit a new and interesting framework. There is a plateau in the low-frequency region. It suggests that nonzero frequencies propagate along the disordered harmonic lattice and that, for both types of diluted disorder, a band of extended vibrational modes arises. It is a new and interesting result. Within our numerical calculations, we observed that the aforementioned band lies roughly within the interval of frequencies $[0, 1.2]$. Therefore, this type of correlated disorder might promote the appearance of a localization-delocalization transition. Data shown in Fig. 3a, b are in a good agreement with the ballistic dynamics found in Fig. 2. In general, both diluted case 1 and 2 exhibiting fast energy propagation. Our spectral calculations suggests that at the diluted case (2), the intensity of the lattice deformation displays a extremely tiny increasing in comparison to the case (1). These small changes are observed in the calculations of $D_{i_0, d_0}(t)$ as well as at the difference between the plateau of the $I(\omega)$ curves for the diluted cases. We also observed a very slight increasing of the width of the region in which that $I(\omega) > 0$ (i.e., bandwidth of extended vibrational modes). However, those discrepancies do not change qualitatively the energy dynamics, neither the diffusion coefficient in both types of diluted disorder. We believe that if we increased the periodicity of the lines with $m_{i,j} = 1$ we would not find any qualitative change in our results.

Before our concluding statements, we briefly discuss the dependence of our results for the spread Σ with the type of initial condition. We emphasize that, in order to compute Σ we injected the energy in an initial site (i_0, j_0) close to center of the lattice. The condition for choosing this position (i_0, j_0) was that its mass $m_{i_0, j_0} = 1$. Therefore, all previous investigations about Σ were done considering the initial energy injected into the periodic sub-lattice. We show some results of Σ by considering the initial energy put on a site i_0, j_0 belonging to the random sub-lattice. In Fig. 4, we plot Σ versus time for both types of diluted disorder and also (A) impulse excitation and (B) displacement excitation. Dynamics is apparently slower than those in the previous cases (see Fig. 2). We got $\Sigma(t) \propto t^{0.9}$ for the case with an initial impulse excitation (Fig. 4a) and $\Sigma(t) \propto t^{0.75}$ for the case with an initial displacement excitation (Fig. 4b). Therefore, our results suggest that the type of dynamics in harmonic lattices with diluted disorder depends on the nature of the initial excitation (impulse or displacement) and also of the initial site (i_0, j_0) . When we started the dynamics by injecting the energy into the periodic

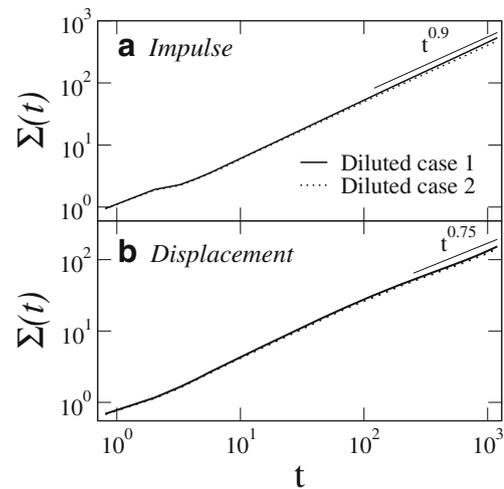


Fig. 4 Σ versus t considering the initial energy put on a site i_0, j_0 belonging to the random sub-lattice (i.e.: the initial site (i_0, j_0) is a site close to the center of chain with $m_{i_0, j_0} \neq 1$). Calculations were done for **a** impulse excitation and **b** displacement excitation

sub-lattice, we obtained a fast ballistic dynamics (for both impulse and displacement excitation). However, if the initial energy pulse were injected into the random sub lattice, the energy flow within the lattice became slower. This phenomena was also observed in one-dimensional systems with diluted disorder [30, 33]. The extended vibrational modes of the models with diluted disorder were localized at periodic sub lattice [33]. Thus, an energy wave-packet initially localized within the random sub lattice has a small contribution from those frequencies with large localization lengths. Consequently, that turns energy dynamics slower.

4 Summary and Conclusions

We studied the energy flow in a harmonic lattice with diluted disorder. Here, the distribution of masses was obtained as a superposition of a random and a periodic mass distribution. By using numerical methods, we solved the classical equations for mass displacement and velocity. We analyzed the energy flow by considering two types numerical tools: (i) the spread of an initially localized energy pulse around the center of lattice and (ii) the evolution of a pulse that is pumping at one side of the lattice. Our calculations suggest that the type of diluted disorder used here promotes the appearance of new extended vibrational modes. We demonstrate numerically that the velocity of energy flow depends on the type of initial energy pulse (impulse or displacement excitation) and also on the initial position of the pulse. Results indicate that if the initial energy pulse is localized at the periodic sub lattice, the dynamics is ballistic. However, if

the initial excitation is fully restricted to the random sub lattice our calculations point to a super diffusive spread.

Acknowledgements This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), CNPq-Rede Nano- bioestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency).

References

1. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1988). For a review see, e.g., I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul and L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York)
2. F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, N.M. Makarov, Anomalous localization in low- dimensional systems with correlated disorder. *Phys. Rep.* **512**, 125–254 (2012)
3. B. Kramer, A. MacKinnon, *Localization: Theory and experiment*. *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469–1564 (1993)
4. J.C. Flores, Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder. *J. Phys. Condens. Matter* **1**, 8471 (1989)
5. D.H. Dunlap, H.L. Wu, P.W. Phillips, Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990)
6. H.L. Wu, P.W. Phillips, Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1366 (1991)
7. F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Delocalization in the 1D Anderson model with long- range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998)
8. F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Europhys. Lett.* **66**, 585 (2004)
9. I.F. dos Santos, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, M.D. Coutinho-Filho, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 476213 (2007)
10. F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.* **91**, (197402-1)(197402-4) (2003)
11. F.A.B.F. de Moura, Absence of localization on the 2d model with long-range correlated off-diagonal disorder. *Eur. Phys. J. B* **78**, 335 (2010)
12. F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999)
13. F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, S.E. Ulloa, Mobility edge in aperiodic Kronig-Penney potentials with correlated disorder: Perturbative approach. *Phys. Rev. B* **63**, 41102 (2001)
14. W.S. Liu, T. Chen, S.J. Xiong, J., Kosterlitz-Thouless-type metal-insulator transition in two-dimensional layered media with long-range correlated disorder. *J. Phys. Condens. Matter* **11**, 6883 (1999)
15. G.P. Zhang, S.-J. Xiong, Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder. *Eur. Phys. J. B* **29**, 491 (2002)
16. V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, Gómez-Alcalá R., Experimental evidence of delocalized states in random dimer superlattices. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999)
17. H. Shima, T. Nomura, T. Nakayama, Localization-delocalization transition in one-dimensional electron systems with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. B* **70**, 075116 (2004)
18. U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. Krokhin, H.J. Stöckmann, Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 633 (2000)
19. H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* **72**, 174207 (2005)
20. H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* **72**, 174207 (2005)
21. A. Croy, M. Schreiber, A. Croy, M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **85**, 205147 (2012)
22. A. Croy, M. Schreiber, A. Croy, M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **85**, 205147 (2012)
23. C. Albrecht, S. Wimberger, Induced delocalization by correlation and interaction in the one-dimensional Anderson model. *Phys. Rev. B* **85**, 045107 (2012)
24. U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. Krokhin, Enhancement of localization in one- dimensional random potentials with long-range correlations. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 126402 (2008)
25. P. Dean, Vibrations of glass-like disordered chains. *Proc. Phys. Soc.* **84**, 727 (1964)
26. H. Matsuda, K. Ishii, Localization of normal modes and energy transport in the disordered harmonic chain. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **45**, 56 (1970)
27. K. Ishii, Localization of eigenstates and transport phenomena in the one- dimensional disordered system. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 77 (1973)
28. F. Domínguez-Adame, E. Maciá, A. Sánchez, Delocalized vibrations in classical random chains. *Phys. Rev. B* **48**, 6054 (1993)
29. P.K. Datta, K. Kundu, The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains. *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 4465 (1994)
30. S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Vibrational modes in harmonic chains with diluted disorder. *Physica A* **357**, 165 (2005)
31. F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, Delocalization in harmonic chains with long-range correlated random masses. *Phys. Rev. B* **68**, 012202 (2003)
32. F.A.B.F. de Moura, F. Domínguez-Adame, Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. *Eur. Phys. J. B* **66**, 165 (2008)
33. S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, E. Lazo, Sensitivity to initial conditions of the wave-packet dynamics in diluted Anderson chains. *Phys. Lett. A* **355**, 468 (2006)